Vol. 46, No. 4
April 2024

ISSN 1024-1809

METALLOPHYSICS and ADVANCED TECHNOLOGIES

МЕТАЛОФІЗИКА ТА НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

METALLOFIZIKA I NOVEISHIE TEKHNOLOGII

Том 46, № 4 (2024)

G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics
National Academy of Sciences of Ukraine
https://mfint.imp.kiev.ua

Засновник: Національна академія наук України, Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України
Видавець: ВД «Академперіодика» НАН України

«Металофізика та новітні технології» ● 'Metallophysics and Advanced Technologies'

Щомісячний науковий журнал ○ A Monthly Research Journal

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕҐІЯ

В. А. Татаренко — *головний редактор, чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
С. В. Ахонін — *акад. НАН України (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)*
М. О. Білоголовський — *проф. (Київський академічний університет НАН та МОН України, Київ)*
Т. М. Брик — *чл.-кор. НАН України (Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів)*
М. О. Васильєв — *проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
В. Г. Гаврилюк — *проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
О. С. Гаценко — *відповідальний секретар редколеґії, канд. фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
Г. Є. Гречнєв — *проф. (Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Вєркіна НАН України, Харків)*
Т. В. Запорожець — *проф. (Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького МОН України, Черкаси)*
О. М. Івасишин — *акад. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
Ю. М. Коваль — *чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
О. А. Кордюк — *акад. НАН України (Київський академічний університет НАН та МОН України, Київ)*
С. О. Котречко — *заступник головного редактора, чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
Ю. В. Кудрявцев — *проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
Є. Г. Лень — *заступник головного редактора, проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
В. В. Лізунов — *проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
В. Ф. Лось — *проф. (Інститут магнетизму НАН та МОН України, Київ)*
П. Є. Марковський — *д-р техн. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
Б. М. Мордюк — *д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
В. М. Нестеренков — *чл.-кор. НАН України (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)*
О. Д. Погребняк — *проф. (Сумський державний університет, МОН України, Суми)*
Ю. М. Подрезов — *д-р фіз.-мат. наук (Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ)*
Т. М. Радченко — *д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
О. Д. Рудь — *проф. (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
В. М. Уваров — *чл.-кор. НАН України (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
А. І. Устінов — *проф. (Інститут електрозварювання ім. Є. О. Патона НАН України, Київ)*
О. В. Філатов — *д-р фіз.-мат. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*
С. О. Фірстов — *акад. НАН України (Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ)*
Т. С. Черепова — *д-р техн. наук (Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ)*

EDITORIAL BOARD

V. A. Tatarenko — *Editor-in-Chief, Cor. Member of the N.A.S.Ukr., G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
S. V. Akhonin — *Member of the N.A.S.Ukr., E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv*
M. O. Belogolovskii — *Professor, Kyiv Academic University, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv*
T. M. Bryk — *Cor. Member of the N.A.S.Ukr., Institute for Condensed Matter Physics, N.A.S.Ukr., Lviv*
M. O. Vasiliev — *Professor, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
V. G. Gavriljuk — *Professor, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
O. S. Gatsenko — *Executive Managing Editor, Ph.D. (Phys.-Math.), G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
G. E. Grechnev — *Professor, B. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, N.A.S.Ukr., Kharkiv*
T. V. Zaporozhets — *Professor, Bohdan Khmelnytsky National University of Cherkasy, M.E.S.Ukr., Cherkasy*
O. M. Ivasishin — *Member of the N.A.S.Ukr., G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
Yu. M. Koval' — *Cor. Member of the N.A.S.Ukr., G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
O. A. Kordyuk — *Member of the N.A.S.Ukr., Kyiv Academic University, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv*
S. O. Kotrechko — *Deputy Editor-in-Chief, Cor. Member of the N.A.S.Ukr, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
Yu. V. Kudryavtsev — *Professor, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
E. G. Len — *Deputy Editor-in-Chief, Professor, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
V. V. Lizunov — *Professor, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
V. F. Los — *Professor, Institute of Magnetism, N.A.S.Ukr. & M.E.S.Ukr., Kyiv*
P. E. Markovsky — *Dr. Sc. (Tech.), G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
B. M. Mordyuk — *Dr. Sc. (Phys.-Math.), G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
V. M. Nesterenkov — *Cor. Member of the N.A.S.Ukr., E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv*
O. D. Pogrebnjak — *Professor, Sumy State University, M.E.S.Ukr., Sumy*
Yu. M. Podrezov — *Dr. Sc. (Phys.-Math.), I. M. Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, N.A.S.Ukr., Kyiv*
T. M. Radchenko — *Dr. Sc. (Phys.-Math.), G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
O. D. Rud' — *Professor, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
V. M. Uvarov — *Cor. Member of the N.A.S.Ukr., G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
A. I. Ustinov — *Professor, E. O. Paton Electric Welding Institute, N.A.S.Ukr., Kyiv*
O. V. Filatov — *Dr. Sc. (Phys.-Math.), G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*
S. O. Firstov — *Member of the N.A.S.Ukr., I. M. Frantsevych Institute for Problems of Materials Science, N.A.S.Ukr., Kyiv*
T. S. Cherepova — *Dr. Sc. (Tech.), G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.Ukr., Kyiv*

EDITORIAL ADVISORY BOARD MEMBERS AND REGIONAL EDITORS

Professor Ing. Ivo Dlouhý
Institute of Physics of Materials, Czech Academy of Sciences, Brno, Czech Republic
Professor Han Dong
School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai, P.R. China
Professor Janusz Dubowik
Institute of Molecular Physics, Polish Academy of Sciences, Poznań, Poland
Professor Leszek B. Magalas
AGH University of Science and Technology, Faculty of Metals Engineering and Industrial Computer Science, Kraków, Poland
Professor Elena V. Pereloma
University of Wollongong, School of Mechanical, Materials and Mechatronic Engineering, Wollongong, Sydney Area, Australia
Dr. Patrice E. A. Turchi
Lawrence Livermore National Laboratory, Condensed Matter and Materials Division, Livermore, CA, U.S.A.

© ВД «Академперіодика» НАН України (Київ), 2024

NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF UKRAINE ● G. V. KURDYUMOV INSTITUTE FOR METAL PHYSICS

AN INTERNATIONAL RESEARCH JOURNAL

METALLOPHYSICS AND ADVANCED TECHNOLOGIES

(Metallofizika i Noveishie Tekhnologii)

FOUNDED IN SEPTEMBER, 1979

Volume 46, No. 4; April 2024

CONTENTS

Editorial Announcements

Information for Foreign Subscribers V

Information for Contributors VII

Structure and Properties of Nanoscale and Mesoscopic Materials

More about the Size Dependence of the Surface Energy of Charged Metal Clusters. Liquid Drop Model
V. V. POGOSOV 289

Metallic Surfaces and Films

Physicochemical Principles of Spinel Formation during Electrode Arc Welding and Cladding Under Flux
N. M. STRELENKO, V. L. KOVALENKO, and R. V. MASTENKO 301

Physics of Strength and Plasticity

Improvement of the Quality Parameters of the Surface Layers of Steel Parts after Aluminizing by Electrospark Alloying. Pt. 2. Results of the Influence of the Productivity of Aluminizing by Electrospark Alloying on the Structural State of Steel Surfaces
O. P. GAPONOVA, V. B. TARELNYK, T. I. ZHYLENKO N. V. TARELNYK, O. O. VASILENKO, and S. V. PAVLOVSKYI 313

Injection of Excess Pressure during the Crystallization Process on the Structure and Power of the Alloy of the Al–Si–Cu System for Aviation Technology
M. M. PETRYSHYN, A. Yu. SEZONENKO, M. M. YAMSHINSKIJ, Ie. G. BYBA, I. V. LUKIANENKO, D. S. LEONOV, A. A. KOLESNICHENKO, R. V. LYTVYN, and M. Yu. BARABASH 325

Energy and Power Parameters of Rolling Profiles for Wheel Rims of Reduced Metal Intensity with Toroidal

© G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, 2024
© Publisher Publishing House 'Akademperiodyka' of the N.A.S. of Ukraine, 2024

Flanges
V. V. CHIGIRINSKY and I. E. VOLOKITINA 343

Mechanical Stability and Brittleness of Metals and Alloys. Pt. 2. The Role of Mechanical Properties
Yu. Ya. MESHKOV and G. P. ZIMINA 355

Crystal-Lattice Defects

The Influence of the Components of the 06ХН28МДТ Alloy (Analogue of AISI904L Steel) and the Parameters of the Model Chloride-Containing Recycled Water of Enterprises on Its Pitting Resistance
A. V. DZHUS, O. E. NARIVSKYI, S. A. SUBBOTIN, T. V. PULINA, G. V. SNIZHNOI, and S. D. LEOSHCHENKO 371

Scientific Editors of Issue—*O. S. Gatsenko, V. A. Tatarenko*
Executive Managing Editor—*O. S. Gatsenko*
Editors—*L. I. Makarenko, M. V. Manilo, I. V. Zagorulko*
The artwork for direct reproduction is made by computer group of EPD of the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine

Editorial Office Address:
G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, EPD—'MNT',
36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine
Telephone: +380 44 4249042. Fax: +380 44 4242561. E-mail: mfint@imp.kiev.ua

Registration Certificate of the Publishing Subject: ДК № 5875 on 13.12.2017
State Registration Certificate of the Printed Mass Medium: media identifier R30-03171.

Approved for publication by the Academic Council of the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine
Published in English or Ukrainian languages according to resolution of Editorial Board of the journal

Printed by Publishing House 'Akademperiodyka', of the NAS of Ukraine
4 Tereshchenkivs'ka Str., UA-01024 Kyiv, Ukraine
Registration Certificate of Publishing Subject: ДК № 544 on 27.07.2001

Journal website: http://mfint.imp.kiev.ua
Journal DOI: https://doi.org/10.15407/mfint

Issue DOI: https://doi.org/10.15407/mfint.46.04

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ ● ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ ім. Г. В. Курдюмова

МЕТАЛОФІЗИКА ТА НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ

МІЖНАРОДНИЙ НАУКОВИЙ ЖУРНАЛ
ЗАСНОВАНИЙ У ВЕРЕСНІ 1979 р.

Том 46, № 4; квітень, 2024

ЗМІСТ

Редакційні оголошення

Інформація для закордонних передплатників V

Інформація для авторів VII

Будова та властивості наномасштабних і мезоскопічних матеріялів

Детальніше про залежність поверхневої енергії заряджених металевих кластерів від розміру. Модель краплі рідини
В. В. ПОГОСОВ 289

Металічні поверхні та плівки

Фізико-хемічні принципи утворення шпінелі під час електродугового зварювання та натоплення під флюсом
Н. М. СТРЕЛЕНКО, В. Л. КОВАЛЕНКО, Р. В. МАСТЕНКО 301

Фізика міцности та пластичности

Поліпшення показників якости поверхневих шарів крицевих деталів після алюмінування електроіскровим леґуванням. Ч. 2. Результати впливу продуктивности алюмінування електроіскровим леґуванням на структурний стан крицевих поверхонь
О. П. ГАПОНОВА, В. Б. ТАРЕЛЬНИК, Т. І. ЖИЛЕНКО, Н. В. ТАРЕЛЬНИК, О. А. ВАСИЛЕНКО, С. В. ПАВЛОВСКИЙ 313

Нагнітання надлишкового тиску в процесі кристалізації на структуру та міцність стопу системи Al–Si–Cu для авіяційної техніки
М. М. ПЕТРИШИН, А. Ю. СЕЗОНЕНКО, М. М. ЯМШИНСЬКИЙ, Є. Г. БИБА, І. В. ЛУК'ЯНЕНКО, Д. С. ЛЕОНОВ, А. А. КОЛЕСНІЧЕНКО, Р. В. ЛИТВИН, М. Ю. БАРАБАШ 325

Енергетичні та енергетичні параметри профілів кочення колісних дисків пониженої металомісткости

© G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, 2024
© Publisher Publishing House 'Akademperiodyka' of the N.A.S. of Ukraine, 2024

з тороїдальними фланцями
В. В. ЧИГИРИНСЬКИЙ, І. Є. ВОЛОКІТІНА 343

Механічна стійкість і крихкість металів і стопів. Ч. 2. Роль механічних властивостей
Ю. Я. МЄШКОВ, Г. П. ЗІМІНА 355

Дефекти кристалічної ґратниці

Вплив компонентів стопу 06ХН28МДТ (аналог криці AISI904L) і параметрів модельної хлоридвмісної оборотньої води підприємств на його тривкість щодо точкової корозії
А. В. ДЖУСЬ, О. Є. НАРІВСЬКИЙ, С. А. СУББОТІН, Т. В. ПУЛІНА, Г. В. СНІЖНОЙ, С. Д. ЛЕОЩЕНКО 371

Наукові редактори випуску: *О. С. Гаценко, В. А. Татаренко*
Відповідальний секретар редакційної колегії *О. С. Гаценко*
Редактор-коректор *О. С. Гаценко*
Технічні редактори *І. В. Загорулько, Л. І. Макаренко, М. В. Маніло*
Художні редактори *І. В. Загорулько, Л. І. Макаренко, М. В. Маніло*
Оригінал-макет для прямого репродукування виготовлено комп'ютерною групою РВВ Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Адреса редакції:
Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, РВВ—Редакція «МНТ»
бульв. Акад. Вернадського, 36; 03142 Київ, Україна
Тел.: +380 44 4249042; факс: +380 44 4242561
Ел. пошта: mfint@imp.kiev.ua
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи: ДК № 5875 від 13.12.2017 р.
Свідоцтво про державну реєстрацію друкованого засобу масової інформації: Ідентифікатор медіа R30-03171.

Затверджено до друку вченою радою Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України
Друкується за постановою редакційної колегії журналу англійською або українською мовами

Підписано до друку 30.04.2024 р. Формат 70 × 100/16.
Ум. друк. арк. 8,37. Обл.-вид. арк. 7,70.
Тираж 55 пр. Зам. № 7283 від 13.05.2024 р.

Віддруковано ВД «Академперіодика» НАН України
вул. Терещенківська, 4; 01024 Київ, Україна
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 544 від 27.07.2001 р.

Сайт журналу: http://mfint.imp.kiev.ua
DOI (журналу): https://doi.org/10.15407/mfint
DOI (випуску): https://doi.org/10.15407/mfint.46.04

INFORMATION (GUIDELINES) FOR CONTRIBUTORS

Submission of Manuscripts: Manuscripts should be sent by e-mail (mfint@imp.kiev.ua). Additionally, they can be sent by regular mail to Executive Managing Editor, Editorial Office, G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, 36 Academician Vernadsky Boulevard, UA-03142 Kyiv, Ukraine. Manuscripts may also be submitted to a member of the Editorial Advisory Board or to the appropriate Regional Editor who is familiar with the research presented.

Submission of a paper to '*Metallophysics and Advanced Technologies*' (transliteration: '*Metallofizika i Noveishie Tekhnologii*', *i.e.*, '*MfNT*') will be taken to imply that it represents original work not previously published, that it is not being considered for publication elsewhere, and that, if accepted for publication, it will not be republished without the consent of the Editors and Publisher. It is a condition of acceptance by the Editor of a manuscript for publication that the Publishers acquire automatically the copyright in the manuscript throughout the world. Journal '*MfNT*' supports the generally accepted principles described in documents on publication ethics and unacceptable practices, which are presented on the journal website.

Scope of the Journal: *Electronic Structure and Properties, Crystal-Lattice Defects, Phase Transformations, Physics of Strength and Plasticity, Metallic Surfaces and Films, Structure and Properties of Nanoscale and Mesoscopic Materials, Amorphous and Liquid States, Interactions of Radiation and Particles with Condensed Matter, Materials in Extremal Conditions, Reactor and Aerospace Metals Science, Medical Metals Science, New Metallic Materials and Synthetic Metals, Metal-Containing Smart Materials, Physical and Technical Basis of Experiment and Diagnostics, Articles under Discussion*.

Language: The language of publication may be English (preferably) or Ukrainian.

Abstract: Each paper requires an abstract of 200–250 words summarizing the significant coverage and findings (the use of mathematical symbols and expressions in abstract is not recommended).

Keywords and PACS numbers: 5–7 keywords and PACS numbers reflecting the content of the contribution should be supplied (see 'Physics and Astronomy Classification Scheme 2010').

Manuscript Preparation: Papers should be formatted according to the template, which can be downloaded from the Journal's website. The length of **research papers** should not in general exceed 5000 words and 10 figures; **review articles** should not exceed 10000 words and 30 figures, including tables and diagrams. Authors are urged to arrange the subject matter clearly under headings such as: 1. Introduction, 2. Experimental/Theoretical Details, 3. Results, 4. Discussion, 5. Conclusion, References. Subsections should be identified with section and subsection numbers (such as 6.1. Second-Value Subheading).

References and Notes: Notes are indicated in the text by consecutive superior Arabic numbers (without parentheses). References should be numbered consecutively (in square brackets) throughout the text. The full list should be collected and typed at the end of the paper in numerical order. Listed references should be completed in all details including **DOI** (if available) but excluding article titles in journals. **All authors'** initials should precede their names. Examples of references preparation:

1. S. O. Firstov and T. G. Rogul, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 1: 127 (2022) (in Ukrainian). https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127
2. V. B. Tarelnyk, O. P. Gaponova, and Ye. V. Konoplianchenko, *Prog. Phys. Met.*, **23**, No. 1: 27 (2022). https://doi.org/10.15407/ufm.23.01.027
3. A. Meisel, G. Leonhardt, and R. Szargan, *Röntgenspektren und Chemische Bindung* [X-Ray Spectra and Chemical Bond] (Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G.: 1977) (in German).
4. J. M. Ziman, *Printsipy Teorii Tverdogo Tela* [Principles of the Theory of Solids] (Moscow: Mir: 1974) (Russian translation).
5. M. A. Stucke, D. M. Dimiduk, and D. M. Hazzledine, *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys. V* (Eds. I. Baker and R. Darolia) (Pittsburgh, PA, USA: MRS: 1993), p. 471.
6. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables* (Eds. M. Abramowitz and I. A. Stegun), Nat'l Bureau of Standards. Appl. Math. Ser. Vol. **55** (Washington, D.C.: U.S. Govt. Printing Office: 1964).
7. B. B. Karpovych and O. B. Borovkoff, *Proc. of Symp. 'Micromaterials Engineering' (Dec. 25–31, 1999)* (Kyiv: RVV IMF: 2000), vol. **2**, p. 113 (in Russian).
8. A. E. Krug, *Abstr. Int. Conf. Phys. Phenomena (Dec. 25–31, 1991, Alushta)* (Kharkiv: 1991), p. 12.
9. T. M. Radchenko, *Vplyv Uporyadkuvannya Defektnoyi Struktury на Transportni Vlastyvosti Zmishanykh Krystaliv* [Influence of Ordering of the Defect Structure on Transport Properties of the Mixed Crystals] (Thesis of Disser. for the Degree of Dr. Phys.-Math. Sci.) (Kyiv: G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.U.: 2015) (in Ukrainian). https://doi.org/10.13140/RG.2.2.35430.22089

10. E. M. Gololobov, V. B. Shipilo, N. I. Sedrenok, and A. I. Dudyak, *Sposob Polucheniya Karbonitridov Metallov* [Production Method of Metal Carbonitrides], Authors' Certificate 722341 SSSR (Publ. November 21, 1979) (in Russian).
11. V. G. Trubachev, K. V. Chuistov, V. N. Gorshkov, and A. E. Perekos, *Sposob Polucheniya Metallicheskikh Poroshkov* [The Technology of Metallic Powder Production]: Patent 1639892 SU. MKI, B22 F9/02, 9/14 (Otkrytiya i Izobreteniya, **34**, No. 13: 11) (1991) (in Russian).
12. Yu. M. Koval' and V. V. Nemoshkalenko, *O Prirode Martensitnykh Prevrashcheniy* [On the Nature of Martensitic Transformations] (Kyiv: 1998) (Prepr./N.A.S. of Ukraine. Inst. for Metal Physics. No. 1, 1998) (in Russian).

Journal title abbreviations should conform to generally accepted styles:
https://www.cas.org/support/documentation/references/corejournals;
https://cdn.journals.aps.org/files/rmpguapb.pdf;
https://images.webofknowledge.com/WOK46P9/help/WOS/A_abrvjt.html;
https://mathscinet.ams.org/msnhtml/serials.pdf.

Equations and Formulae: Formulas in the text should be inserted by **MathType**, fully compatible with MS Office. Vectors should be typed in bold without arrows above. Note that complicated formulae, mathematical expressions or (de)notations are not recommended in the title, abstract, and keywords.

Tables: Number tables consecutively with Arabic numerals and give a clear descriptive caption at the top.

Figures: All figures should be numbered with consecutive Arabic numbers, have descriptive captions and be mentioned in the text. Keep figures separate at the end of the text and clearly label each figure with author's name and figure number. The labels at axis should contain the designation (or notation) of quantities and their units.

Preparation: Figures submitted must be of a high enough standard for reproduction with 300–600 dpi resolution (including half-tone illustrations). Redrawing or retouching of unusable figures will be charged to the authors.

Colour Plates: Whenever, the use of colour is an integral part of the research, or where the work is generated in colour, the Journal will publish (in paper version) the colour illustrations with charge to the author. Reprints in colour will carry a surcharge. Please write to the Publisher for details.

Submission of Electronic Text: Authors should submit the electronic version of their paper by e-mail to the Editorial Office. The text file should be saved in the native formats of the MS Word with a name consisting the name of the first author, for example, Hotovchenko.docx. The electronic form of figures (in TIF, EPS, JPG, PNG formats preferably and with name consisting the name of the first author also, for example, Hotovchenko_fig2a.jpg) should be planned so that they reduce to 12.7 cm column width (or less), and keep them separated from the text file. It is desirable to submit additionally all the **figures** within the format of the program, in which they were created.

Proofs: Contributors will receive page proofs for correction by e-mail as a PDF document. These must be returned to Kyiv office (mfint@imp.kiev.ua with subject beginning by word 'mfint') within 5 days of receipt.

Page Charges: There are no page charges to individuals or institutions.

Reprints: Authors can freely download a PDF version of their published article from journal website: https://mfint.imp.kiev.ua. The printed issues may be ordered by completing the appropriate form sent with proofs and prepaid by authors under the terms as for subscription.

Further Information: All questions arising during the **peer review** or after acceptance of manuscripts, especially those relating to reprints, should be directed to G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, Executive Managing Editor, Editorial Office, 36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine;
Fax: +380 44 4242561, e-mail: mfint@imp.kiev.ua (with subject beginning by word 'mfint').
We ask the authors to apply with their manuscript Copyright Transfer Agreement form.

Copyright Transfer Agreement

We, the undersigned authors of the manuscript '_____', transfer to the Founders, Publisher, and Editorial Board of the Journal 'Metallophysics and Advanced Technologies' (according to agreements between them) the right to publish this manuscript in original language or in translation to the other languages. We confirm that publication of this manuscript **will not** infringe a copyright of other persons or organizations and publication ethics.

Author(s):_____
(Last Name, First Name, Affiliation)

Correspondence Address:_____

Phone and e-mail: _____

_____ _____
(Signature) *(Date)*

ІНФОРМАЦІЯ (ПРАВИЛА) ДЛЯ АВТОРІВ

Науковий журнал «Металофізика та новітні технології» (МфНТ) щомісяця публікує статті, які раніше ще не публікувалися та не перебувають на розгляді для опублікування в інших виданнях. Статті мають містити результати експериментальних і теоретичних досліджень в області фізики та технологій металів, стопів і сполук з металічними властивостями; рецензії на монографії; інформацію про конференції, семінари; відомості з історії металофізики; рекламу нових технологій, матеріялів, приладів. Журнал дотримується загальноприйнятих принципів, зазначених на його сайті в документах з публікаційної етики та щодо неприйнятних практик.

Тематика журналу: *Електронні структура та властивості, Дефекти кристалічної ґратниці, Фазові перетворення, Фізика міцности та пластичности, Металічні поверхні та плівки, Будова та властивості наномасштабних і мезоскопічних матеріялів, Аморфний і рідкий стани, Взаємодії випромінення та частинок із конденсованою речовиною, Матеріяли в екстремальних умовах, Реакторне й авіакосмічне металознавство, Медичне металознавство, Нові металеві матеріяли та синтетичні метали, Металовмісні смарт-матеріяли, Фізико-технічні основи експерименту та діягностики, Дискусійні повідомлення.*

Статті публікуються однією з двох мов: англійською (віддається перевага) або українською.

Статті, в оформленні яких не дотримано наступних правил для опублікування в МфНТ, повертаються авторам без розгляду по суті. (Датою надходження вважається день повторного надання статті після дотримання зазначених нижче правил.)

1. Стаття має бути підписаною всіма авторами (із зазначенням їхніх адрес електронної пошти); слід вказати прізвище, ім'я та по батькові автора, з яким редакція буде вести листування, його поштову адресу, номери телефону та факсу й адресу електронної пошти.

2. Виклад матеріялу має бути чітким, **структурованим** (розділами, наприклад, «1. Вступ», «2. Експериментальна/Теоретична методика», «3. Результати та їх обговорення», «4. Висновки», «Цитована література»), стислим, без довгих преамбул, відхилень і повторів, а також без дублювання в тексті даних таблиць, рисунків і підписів до них. Анотація та розділ «Висновки» мають не дублювати один одного. Числові дані слід наводити в загальноприйнятих одиницях.

3. Об'єм оригінальної (неоглядової) статті має бути не більше 5000 слів (з урахуванням основного тексту, таблиць, підписів до рисунків, списку використаних джерел) і 10 рисунків. **Об'єм оглядової статті** — до 10000 слів та 30 рисунків.

4. За потреби до редакції може надаватися друкований (А4, подвійний інтервал) примірник рукопису з ілюстраціями.

5. До редакції обов'язково надається (по **e-mail**) файл статті, набраний у текстовому редакторі Microsoft Word, з назвою, що складається з прізвища першого автора (латиницею), наприклад, Hotovchenko.docx.

6. Електронна версія рукопису та його друкований варіянт (в разі його надання) мають бути ідентичними. Вони мають оформлюватися за шаблоном, який можна завантажити з сайту журналу, і містити 5–7 **індексів PACS** в редакції 'Physics and Astronomy Classification Scheme 2010'. Тексти статей мають також містити **назву статті**, **список авторів**, **повні назви** та **поштові адреси установ**, в яких вони працюють, **анотацію статті** (200–250 слів), **5–7 ключових слів** двома мовами (**англійською** та **українською**), а заголовки таблиць і підписи до рисунків мають подаватися **як мовою рукопису, так і англійською мовою**; англомовна анотація може бути представленою в більш розгорнутому варіянті (до 500 слів). Назва статті, її анотація та ключові слова мають не містити складні формули, математичні вирази чи позначення.

7. Електронні версії рисунків мають бути представленими у вигляді окремих файлів (у форматах TIF, EPS, JPG, PNG з розріжненням у 300–600 dpi) з назвами, що складаються з прізвища першого автора (латиницею) та номера рисунка, наприклад, Hotovchenko_fig2a.jpg. Додатково рисунки надаються у форматі програми, в якій вони створювалися.

8. Написи на рисунках (особливо на півтонових) слід по можливості замінити літерними позначеннями (набраними на контрастному фоні), а криві позначити цифрами або різними типами ліній/маркерів, які мають бути роз'ясненими в підписах до рисунків або в тексті. На графіках усі лінії/маркери мають бути достатньої товщини/розміру для якісного відтворення їх у зменшеному в 2–3 рази вигляді (рекомендована початкова ширина рисунка — 12,7 см). Світлини мають бути чіткими та контрастними, а написи та позначення мають не закривати істотні деталі (для чого можна використовувати стрілки). Замість зазначення в підтекстовці збільшення під час зйомки бажано проставити масштаб (на контрастному фоні) на одній з ідентичних світлин. На графіках підписи до осей, **виконані мовою статті**, мають містити позначення (або найменування) величин, що відкладаються вздовж осей, і відділені комою їхні одиниці вимірювання.

9. Формули в текст треба вставляти за допомогою редактора формул **MathType**, сумісного з MS Office. **Вектори** слід набирати напівтовстим шрифтом без стрілок зверху.

10. Рисунки, таблиці, формули, а також підрядкові **примітки (виноски)** мають нумеруватися поспіль по всій статті.

11. Посилання на літературні джерела слід давати у вигляді порядкового номера, надрукованого в рядок у квадратних дужках. Список цитованої літератури складається почергово за першою згадкою джерела. Приклади оформлення посилань наведено нижче (просимо звернути увагу на порядок розташування ініціалів і прізвищ авторів, бібліографічних відомостей і на розділові знаки, а також на необхідність зазначення **всіх** співавторів цитованої роботи та її ідентифікатора **DOI**, якщо він є):

1. S. O. Firstov and T. G. Rogul, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 1: 127 (2022) (in Ukrainian). https://doi.org/10.15407/mfint.44.01.0127
2. V. B. Tarelnyk, O. P. Gaponova, and Ye. V. Konoplianchenko, *Prog. Phys. Met.*, **23**, No. 1: 27 (2022). https://doi.org/10.15407/ufm.23.01.027
3. A. Meisel, G. Leonhardt, and R. Szargan, *Röntgenspektren und Chemische Bindung* [X-Ray Spectra and Chemical Bond] (Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G.: 1977) (in German).
4. J. M. Ziman, *Printsipy Teorii Tverdogo Tela* [Principles of the Theory of Solids] (Moscow: Mir: 1974) (Russian translation).
5. M. A. Stucke, D. M. Dimiduk, and D. M. Hazzledine, *High Temperature Ordered Intermetallic Alloys. V* (Eds. I. Baker and R. Darolia) (Pittsburgh, PA, USA: MRS: 1993), p. 471.
6. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables* (Eds. M. Abramowitz and I. A. Stegun), Nat'l Bureau of Standards. Appl. Math. Ser. Vol. **55** (Washington, D.C.: U.S. Govt. Printing Office: 1964).
7. B. B. Karpovych and O. B. Borovkoff, *Proc. of Symp. 'Micromaterials Engineering' (Dec. 25–31, 1999)* (Kyiv: RVV IMF: 2000), vol. **2**, p. 113 (in Russian).
8. A. Eh. Krug, *Abstr. Int. Conf. Phys. Phenomena (Dec. 25–31, 1991, Alushta)* (Kharkiv: 1991), p. 12.
9. T. M. Radchenko, *Vplyv Uporyadkuvannya Defektnoyi Struktury на Transportni Vlastyvosti Zmishanykh Krystaliv* [Influence of Ordering of the Defect Structure on Transport Properties of the Mixed Crystals] (Thesis of Disser. for the Degree of Dr. Phys.-Math. Sci.) (Kyiv: G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S.U.: 2015) (in Ukrainian). https://doi.org/10.13140/RG.2.2.35430.22089
10. E. M. Gololobov, V. B. Shipilo, N. I. Sedrenok, and A. I. Dudyak, *Sposob Polucheniya Karbonitridov Metallov* [Production Method of Metal Carbonitrides], Authors' Certificate 722341 SSSR (Publ. November 21, 1979) (in Russian).
11. V. G. Trubachev, K. V. Chuistov, V. N. Gorshkov, and A. E. Perekos, *Sposob Polucheniya Metallicheskikh Poroshkov* [The Technology of Metallic Powder Production]: Patent 1639892 SU. MKI, B22 F9/02, 9/14 (Otkrytiya i Izobreteniya, **34**, No. 13: 11) (1991) (in Russian).
12. Yu. M. Koval' and V. V. Nemoshkalenko, *O Prirode Martensitnykh Prevrashcheniy* [On the Nature of Martensitic Transformations] (Kyiv: 1998) (Prepr./N.A.S. of Ukraine. Inst. for Metal Physics. No. 1, 1998) (in Russian).

Слід використовувати загальноприйняті скорочення назв журналів:
https://www.cas.org/support/documentation/references/corejournals;
https://cdn.journals.aps.org/files/rmpguapb.pdf;
https://images.webofknowledge.com/WOK46P9/help/WOS/A_abrvjt.html;
https://mathscinet.ams.org/msnhtml/serials.pdf.

Необхідною вимогою є також надання авторами додаткового списку цитованої літератури (**References**) в **латинській транслітерації** (система **BGN/PCGN**; рекомендовані транслітератори: http://www.slovnyk.ua/services/translit.php; http://ru.translit.net/?account=bgn).

Після транслітерованих назв книг, дисертацій, патентів та ін. слід у квадратних дужках наводити їхній англомовний переклад (див. приклади вище). При транслітерації статей з МфНТ слід використовувати написання П.І.Б. авторів, наведені **лише** в англомовному змісті відповідного випуску, і **офіційну** транслітеровану назву журналу (див. також першу сторінку кожної статті та сайт).

12. Коректура авторам надсилається електронною поштою у вигляді pdf-файлу після завершення етапу **рецензування**. На перевірку коректури авторам відводяться 5 робочих днів. Після закінчення зазначеного терміну стаття автоматично направляється до друку. Виправлення слід відмітити та прокоментувати в самому pdf-файлі або оформити у вигляді переліку виправлень (підписаного уповноваженим представником колективу авторів) і переслати електронною поштою на адресу редакції.

Електронний варіянт статті надсилається на e-mail: mfint@imp.kiev.ua (з темою, що починається словом 'mfint'). Друкована версія рукопису (якщо у ній є потреба) надсилається за адресою: **Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, редакція МфНТ; бульвар Акад. Вернадського, 36; 03142 Київ, Україна** або відповідному реґіональному редактору (див. сайт).

Автори можуть вільно завантажити pdf-файли опублікованих статей з сайту журналу (https://mfint.imp.kiev.ua), а також замовити друковані примірники випуску журналу зі своєю статтею, надіславши до редакції журналу **разом з коректурою відповідну заявку та квитанцію про оплату** друку необхідної кількості примірників випуску на умовах, аналогічних передплатним.

Відповідно до угод між редакцією МфНТ, засновниками та видавцем журналу, редакція вважає, що автори, надсилаючи їй рукопис статті, передають засновникам, видавцю та редколеґії право опублікувати цей рукопис мовою ориґіналу та в перекладі іншими мовами, і просить авторів відразу прикладати до рукопису «Угоду про передачу авторського права».

Угода про передачу авторського права

Ми, що нижче підписалися, автори рукопису «_____», передаємо засновникам, видавцю та редколеґії журналу «Металофізика та новітні технології» (згідно з угодами між ними) право опублікувати цей рукопис мовою ориґіналу та в перекладі іншими мовами. Ми підтверджуємо, що ця публікація **не** порушує авторського права інших осіб або організацій і принципів наукової етики. При цьому за авторами зберігаються всі інші права як власників цього рукопису.

Підписи авторів: _____ (П.І.Б., дата, адреса, тел., e-mail)

Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2024, vol. 46, No. 4, pp. 289–300
https://doi.org/10.15407/mfint.46.04.0289
Reprints available directly from the publisher

© 2024 G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Published by license under
the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics–
N.A.S. of Ukraine Publishers imprint.
Printed in Ukraine.

PACS numbers: 36.40.Wa, 41.20.Cv, 61.50.Lt, 68.03.Cd, 71.15.Nc, 82.60.Qr

More about the Size Dependence of the Surface Energy of Charged Metal Clusters. Liquid Drop Model

V. V. Pogosov

Zaporizhzhia Polytechnic National University,
64 Zhukovsky Str.,
UA-69063 Zaporizhzhya, Ukraine

The problem of the sign of the size correction to the surface energy per unite area of a single charged metal nanocluster within the liquid-drop model (LDM) is considered. Within the stabilized jelly model detailing the LDM, the effective radii of the electron cloud for Cs, Na, Mg and Al clusters are estimated from the asymptotic behaviour of the electrical capacitance calculated by the Kohn–Sham method. The uncertainty of the cluster boundary associated with the atomic-scale roughness and nonsphericity of the surface, with taking into account the effective radius of the electron cloud of the cluster, can lead to an inversion of the sign of the size correction for surface tension. The distribution function of Cs clusters by charge and number of atoms in dense vapour on the saturation line is estimated. The fact that the surface energy of a metal depends on the dielectric constant $\tilde{\varepsilon}$ as weighted average over the area of contact with the external environment is discussed. A metal droplet on a dielectric substrate and a droplet in its own dense vapour are discussed as appropriate contacts. The dependence of surface tension on $\tilde{\varepsilon}$ for Cs, Na, Mg, Pb, Au and Al is calculated. Contact of a droplet with a dielectric substrate always leads to a decrease in surface energy.

Key words: surface energy, metal nanocluster, electron-cloud radius, stabilized jelly model.

Розглянуто проблему знаку розмірної поправки до питомої поверхневої енергії відокремленого зарядженого металевого нанокластера в крапельному моделі. У моделі стабільного желе, що деталізує краплинний модель, з асимптотичної поведінки електричної місткости, розрахованої методом

Corresponding author: Valentyn Val'terovych Pogosov
E-mail: vpogosov@zntu.edu.ua

Citation: V. V. Pogosov, More about the Size Dependence of the Surface Energy of Charged Metal Clusters. Liquid Drop Model, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **46**, No. 4: 289–300 (2024). DOI: 10.15407/mfint.46.04.0289

Кона–Шема, оцінено ефективні радіюси електронної хмари для кластерів Cs, Na, Mg й Al. Невизначеність межі кластера, яка пов'язана з шерсткістю атомарного масштабу та несферичністю поверхні, а також ефективного радіюса електронної хмари кластера можуть приводити до інверсії знаку розмірної поправки поверхневого натягу. Оцінено функцію розподілу кластерів Cs за зарядом і числом атомів у них у густих парах на лінії наситу. Обговорюється той факт, що поверхнева енергія металу залежить від середньозваженої по площі контакту із зовнішнім середовищем діелектричної константи $\tilde{\varepsilon}$. Як доречний контакт обговорюється металева крапелька на діелектричній підкладинці та крапля в густому власному парі. Розраховано залежність поверхневого натягу від $\tilde{\varepsilon}$ для Cs, Na, Mg, Pb, Au й Al. Контакт завжди приводить до зменшення поверхневої енергії.

Ключові слова: поверхнева енергія, металевий нанокластер, радіюс електронної хмари, модель стабільного желе.

(Received 5 November, 2023; in final version, 15 December, 2023)

1. INTRODUCTION

The role of surface effects in the processes of condensation, melting, evaporation and emission of charged particles increases with decreasing cluster sizes. Moreover, the characteristics of these effects, such as the melting temperature, surface tension, electron and ion work functions, the heat of atom evaporation, and the vacancy formation energy themselves begin to depend on the size of the clusters.

The free energy per unite area of the spherical surface between two phases can be represented in the asymptotic form as

$$\gamma(R) = \gamma_0 \pm \frac{\gamma_1}{R} + O\left(\frac{1}{R^2}\right) \equiv \gamma_0(1 + k\delta)\,, \tag{1}$$

where γ_0 is the energy of flat surface, $\delta = \gamma_1/\gamma_0$, and $k = \pm 1/R$ is a signed curvature.

The problem of the dependence of the surface tension of vapour bubbles and liquid droplets on the radius of curvature of the equimolecular surface is the subject of numerous theoretical and experimental studies for simple and polar liquids [1–8].

The diversity of approaches and methods has not yet led to a unity of views even on the qualitative nature of such dependence. Experimental data for nucleation in simple liquids indicate that at temperatures close to critical, the surface tension of vapour bubbles is less than at a flat boundary [5].

Within the framework of the Gibbs separating surface method, Tolman, Kirkwood and Buff [1, 2] formulated a visual definition of δ as twice the distance between positions of the Gibbs 'tension' surface and the equimolecular one, R. The Kirkwood–Buff statistical calcula-

tion leads to a decrease in the surface tension of the drop (the 'tension' surface position for $k = +1/R$ is closer to the condensed phase than to the vapour). However, numerical calculations for $\gamma(R)$ within the framework of the van der Waals model for a bubble in a superheated liquid indicate the sensitivity of the magnitude and sign of the parameter δ to the choice of model and calculation method.

In [10], crystalline Ar clusters of 'almost spherical' shape were studied. In the nearest-neighbour approximation, the total surface energy and parameter δ were calculated for a spherical particle. Then attention is drawn to the fact that a 'real' close-packed cluster is not a sphere, but a polyhedron. In this case, it is proposed to take the radius of a spherical surface described around a polyhedron as an equimolecular surface. This radius is larger than the previous one by approximately the average distance between atoms, *i.e.*, the renormalized quantity $\delta' \approx \delta - 2r_0 < 0$ is introduced. In review [11], this technique is recommended for calculating the specific surface energy of solid clusters.

Relatively little attention has been paid to the size dependence of the surface tension $\gamma(R)$ of metal droplets, which is apparently due, firstly, to the complexity of a consistent description of the surface of a liquid metal plasma, and, secondly, to the lack of reliable experimental data. From an analysis of the evaporation rate of microdroplets deposited on a carbon substrate, the value of $\delta \cong -11.4$ and $-10.4a_0$ (a_0 is the Bohr radius) was estimated for Pb and Au, respectively [12, 13]. In [14], the size dependence of the wetting angle of Pb nanodroplets on a carbon substrate was measured, which leads to the value $\delta \cong -2.5a_0$. These results confirm the conclusions of thermodynamics [3, 7] about the presence of a negative size correction to the surface tension of a flat surface, thereby indicating the existence of a general nature of the dependence for microscopic droplets of a simple liquid with short-range interaction forces between atoms, and for metal clusters (the Coulomb systems).

In one of the first works [15], using the Kohn–Sham method in the model of ordinary jelly at zero temperature, a noticeable size dependence of surface energy $\sigma(R)$ of solid Na clusters was not detected at all. Then, in [16], using the same model and the Ritz method, the value δ for alkali metal clusters ($\delta > 0$) was calculated for the first time. In [17], the quantity was 'extracted' from the vacancy formation energy

$$\varepsilon^{\mathrm{vac}} = 4\pi r_0^2\, \sigma_0(1 + k^{\mathrm{vac}}\delta),\ k^{\mathrm{vac}} = -1 / r_0 . \tag{2}$$

Using these magnitudes of δ, it turned out to be possible to obtain good values for the atomic cohesion energy

$$\varepsilon^{\mathrm{coh}} = 4\pi r_0^2\, \sigma_0(1 + k^{\mathrm{coh}}\delta),\ k^{\mathrm{coh}} = +1 / r_0 . \tag{3}$$

In Ref. [18], these results were tested in two ways: by the numerical

solution of the Euler–Lagrange equation in the gradient expansion of the electron density functional and using the Kohn–Sham method. As a result, $\delta = 1.76$ and $2.76a_0$ were found for Na and Cs, respectively. The authors of [18, 19] concluded that $\delta > 0$ for all metal clusters.

In the two-component model of a liquid metal plasma [20, 21], the Fisher–Wortis formula for δ [4] was generalized to the case of the Coulomb liquids and obtained for an ideally smooth convex spherical surface.

For $\sigma(R)$ at low temperatures, using the semi-empirical Frenkel–Langmuir rule, it was found that $\delta/r_0 \cong 1/2$ for metals and inert gases [21]. It follows that the surface area of the radius r_0 is well described the experimental data in LDM, however, the radius of a many-atomic cluster apparently needs to be renormalized.

Modern data on the melting of small metal clusters [22–24] confirm and complement the analytical results of Pavlov [25]: as the cluster size decreases, firstly, the melting temperature decreases, and secondly, only at cluster radii $R \leq 1$ nm (at which already quantum size effects are significant) the size dependence of the melting temperature becomes noticeable. As noted in [22], the process of melting a cluster consisting of hundreds of atoms, firstly, corresponds to an uncertainty in the melting temperature—a pre-melting stage, extended in temperature by 10–15 K, which creates uncertainty in the atomic density and cluster size; secondly, the diffusion of surface vacancies into the bulk is more favourable for clusters with unfilled electron shells than for magic clusters. These key observations indicate the complexity of the problem, the complex physics, and are useful for a comprehensive analysis of the semi-classical size dependence of surface energy. The value $R = 1$ nm corresponds to the numbers of atoms in cluster $N \cong 38$, 106, 181 and 254 for Cs, Na, Mg and Al, respectively.

As follows from the above, microscopic calculations for droplets of metals and simple liquids, as well as semi-empirical estimates, give opposite size dependences $\gamma(R)$ and $\sigma(R)$, which makes its study relevant in the future.

2. BASIS OF CONSIDERATION

The total energy of a droplet, with ideal sphericity of its surface (*i.e.*, 'point-likeness' of atoms), is represented as the sum of the energy of the volume and surface:

$$E = E^{\text{bulk}} + E^{\text{surf}},\ E^{\text{bulk}} \propto R^3,\ E^{\text{surf}} \propto R^2 . \tag{4}$$

In fact, (4) is an expansion of the total energy in powers of R^{-1}, implying a well-defined quantity R. However, the atomic-scale surface roughness does not allow one to determine accurately the cluster

boundary. Therefore, for example, the scattering of conduction electrons on the surface of nanoclusters is predominantly diffuse, which is important when calculating the optical characteristics of mono- and bimetallic nanospheres [26].

The value E of a cluster consisting of N atoms can be calculated in any model and then represented as an expansion in powers of $N^{-1/3}$, not R^{-1}. For example, within the framework of *ab initio* calculations, a many-particle potential is first formed, and then, by sorting through atomic configurations, the total force from all atoms on a selected atom is equal to zero, *etc*. As a result, the equilibrium shape of the cluster in vacuum, temperature $T = 0$ and distances between atoms correspond to zero pressure [20, 21, 27–30], which can be considered as a mechanical analogue of thermodynamics (criticism of the thermodynamic approach for clusters in a rarefied atmosphere was given in [13]). The resulting cluster shape is never spherical.

In fact, the cluster can be conditionally represented as a sphere (see Fig. 1 in [10]) only for such numbers as $N_n = 13, 55, 147, 309, \ldots$, which correspond to numbers $n = 1, 2, 3, 4, \ldots$ of coordination spheres of atoms. Only clusters with such N_n are polyhedra, close-packed atoms (balls of radius r_0) Representing the total number of atoms in a cluster as a sum $N_n = N_n^{\text{bulk}} + N_n^{\text{surf}}$, we can introduce the corresponding radii in the form

$$\mathcal{R} = r_0(n + \xi)\,. \tag{5}$$

The coefficient $\xi = 0$ corresponds to the surface passing through the centres of the corner atoms of the polyhedron, and $\xi = 0.66$ and $2^{-1/2}$ corresponds to the equimolecular surface of the icosahedron and cuboctahedron, respectively [10].

In Gibbs theory, the total surface energy of a cluster does not depend on the choice of the radius of the dividing surface:

$$E^{\text{surf}} = \sigma(R)S(R) = \sigma(\mathcal{R})S(\mathcal{R})\,. \tag{6}$$

Then

$$\sigma(\mathcal{R}) = \frac{S(R)}{S(\mathcal{R})}\sigma_0\left(1 + \frac{\delta}{\mathcal{R}}\right) = \sigma_0\left(1 + \frac{\delta - 2r_0}{\mathcal{R}}\right) + O\left(\frac{\delta^2}{\mathcal{R}^2}\right), \tag{7}$$

which, taking into account (5), leads to the expression

$$\frac{\sigma(\mathcal{R})}{\sigma_0} = 1 + \frac{\tilde{\delta} - 2\xi}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right),\ \tilde{\delta} \equiv \frac{\delta}{r_0}, \tag{8}$$

provided that the second term in r.h.s of (8) is much less than 1.

3. CALCULATION RESULTS AND DISCUSSION

In LDM, which has proven itself well in nuclear physics and the physics of metal clusters [31–36], a unique correspondence is established between the radius of the cluster (ion core) and N

$$R = N^{1/3} r_0 . \tag{9}$$

In classical electrostatics, the capacitance of a conducting sphere is determined by its radius R. In LDM, the boundary of a positively charged (ionic) core is always determined by the coordinate $r = R$. However, the electron liquid spill-out beyond this boundary. Renormalization of the surface area can be carried out taking into account the effective radius of the electron cloud [34], which determines the electrical capacitance.

In Refs. [36, 37], we studied the energy characteristics of charged solid metal clusters and clusters containing a single vacancy in the stabilized jelly model detailing the LDM for $N \le 270$, using the Kohn–Sham method taking into account the quantization of the electron spectrum. Let us use these results.

All energy characteristics, in particular, the ionization potential of the cluster IP_N and the energy of electron affinity EA_N, have a strong oscillatory dependence due to the spherical electron shell structure. According to Koopmans' theorem

$$IP_N = -\varepsilon_N^{\mathrm{HO}} + \frac{(+e)^2}{2\mathcal{C}_N^+}, \; EA_N = -\varepsilon_N^{\mathrm{LU}} + \frac{(-e)^2}{2\mathcal{C}_N^-}, \tag{10}$$

where $\varepsilon_N^{\mathrm{HO}}$, $\varepsilon_N^{\mathrm{LU}}$ and $\mathcal{C}_N^{\pm}$ are the energies of the upper occupied and lower unoccupied orbitals, and electrical capacitances of positively and negatively charged clusters, respectively.

Independent calculation of self-consistent quantities IP_N, EA_N, $\varepsilon_N^{\mathrm{HO}}$ and $\varepsilon_N^{\mathrm{LU}}$ allows one to calculate the capacitances of charged

$$\mathcal{C}_N^Z = \frac{e^2}{2(IP_N + \varepsilon_N^{\mathrm{HO}})} \; (Z = +1), \; \mathcal{C}_N^Z = \frac{e^2}{2(EA_N + \varepsilon_N^{\mathrm{LU}})} \; (Z = -1) , \tag{11}$$

as well as neutral

$$\mathcal{C}_N^Z = \frac{e^2}{IP_N + \varepsilon_N^{\mathrm{HO}} - EA_N - \varepsilon_N^{\mathrm{LU}}} \; (Z = 0) \tag{12}$$

clusters (e is elementary positive charge). For large spheres in the Hartree units ($e = m = \hbar = 1$)

$$\mathcal{C}_N^Z \to r_0(n + \xi_{\mathcal{C}}^Z) = \mathcal{R} . \tag{13}$$

TABLE 1. The results of calculations in LDM for $T = 0$ K.

Metal	r_0/a_0	$\tilde{\delta}$	ξ_C^Z		
			$Z = -1$	$Z = 0$	$Z = +1$
Cs	5.63	0.26	0.40	0.36	0.33
Na	3.99	0.32	0.42	0.32	0.32
Mg	3.39	0.54	0.37	0.54	0.46
Al	2.99	0.57	0.44	0.57	0.57

In fact, this is the effective radius of the electron cloud. Next, from asymptotic behaviour of the cohesion energy (Fig. 8 in [36]) and electrical capacitance (Fig. 6 in [36]) for the magic numbers of atoms, the values of $\tilde{\delta}$ and ξ_C^Z were found (Table 1).

The value ξ_C^0, for example, for Na, exceeds by approximately 10% the similar value calculated in a different way in [34], and the values $\xi_C^{-1} > \xi_C^0 > \xi_C^{+1}$ differ too by approximately 10% from each other. It should still be noted that the magic numbers of atoms in LDM [36], as a rule, do not coincide with n those in formula (13).

Let us recall that the value ξ_C^Z must refer to expression (8) for clusters whose shape is close to spherical. In the future, for estimates with arbitrary N, we will use a hybrid approach and the formula

$$\frac{\sigma^Z(\mathcal{R})}{\sigma_0} = 1 + \frac{\tilde{\delta} - 2\xi_C^Z}{N^{1/3}} + O\left(\frac{1}{N^{2/3}}\right) \tag{14}$$

(on the issue of redefining the cluster radius, see also Ref. [38]).

Effects associated with the curvature of the surface of atomic clusters and the temperature dependence of surface properties can determine the energetically favourable formation of cluster components in plasma and their ability to accumulate an electric charge.

It is possible to estimate the distribution function of Cs clusters by charge and number of atoms in them in dense vapour on the saturation line using LDM in a similar way to how we did it earlier when calculating the ionization equilibrium in plasma (see details in [39] and [40]). Caesium was chosen due to relatively low temperatures and the availability of reliable data for calculations. The dependence of the density and pressure of caesium vapour on the temperature at the saturation line is well known (unknown, however, is the temperature behaviour of surface tension at temperatures above the melting point).

Therefore, having made a replacement $\sigma \to \gamma(T)$ in (14), we then used a decreasing linear temperature dependence $\gamma_0(T)$ from the melting point to the critical point, at which it is precisely known that $\gamma_0 = 0$; from Table 1 the values $\tilde{\delta}$ and ξ_C^Z, were taken, calculated at $T = 0$ K (in the two-component model [20] near the melting point for alkali metals,

the calculated dependence $\delta(T)$ turned out to be weak).

In the theory of nucleation, it is believed that droplets containing more than a dozen particles are macroscopic. Such droplets are considered when describing heterogeneous nucleation in supersaturated vapour. For estimations on the saturation line, we used the expression:

$$n_N^Z(T) \propto \frac{1}{\lambda_T^3} N^4 \exp\left\{-\frac{1}{T}\left[\sigma^Z(\mathcal{R}, T) + \frac{Z^2}{2\varepsilon_v \mathcal{C}_N^Z}\right]\right\}, \tag{15}$$

where λ_T is the thermal wavelength of the atom in the vapour, $\varepsilon(T)$ is the dielectric constant of the vapour [39, 40].

In Figure 1, *a* for caesium, the normalized distributions of clusters by the number of atoms in them are shown. The applicability of LDM is determined mainly by the half-width of the cluster concentration distribution $n_N^Z(T)$ (Fig. 1, *a*) and values $N^*(T)$ (Fig. 1, *b*). For $N = N^*(T)$ the functions $n_N^Z(T)$ have maxima in Fig. 1, *a*. With increasing temperature, the maxima $n_N^{+1}(T)$ shift towards higher N. The half-width of the distribution is quite large, so in the problem when averaging with a function $n_N^Z(T)$, the main contribution will come from large clusters. For comparison, Fig. 1, *b* shows the result of the calculation for which the size dependence of the surface energy in (14) is completely absent. The negative sign of the correction in (14) indicates favourable formation of heavier clusters in the metal–vapour–plasma, and Fig. 1, *b* demonstrates the sensitivity of the LDM applicability to the description of critical phenomena.

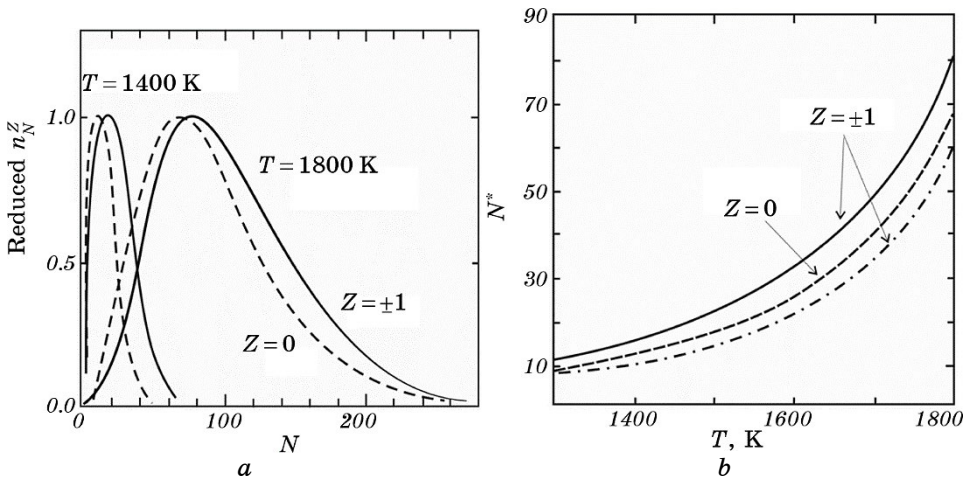


Fig. 1. Calculated dependences $n_N^Z(T)$ and $N^*(T)$ on the saturation line for Cs vapour. The dash-dotted curve indicates the dependence $N^*(T)$ calculated under the assumption $\sigma^Z(N)/\sigma_0 = 1$ in (14).

In conclusion, let us pay attention to the possible refinement of experimental data on the surface tension of liquid metal nanodroplets obtained by measuring the size dependence of the Young contact angle [12, 14].

It is known that in the statistical description of a metal drop, the pressure tensor, including $T = 0$ K, contains the Maxwell stress tensor, which depends on the dielectric constant of the environment [20, 41, 42]. Recent works [41–43] have developed an approach to the problem of a metal surface with a non-uniform dielectric coating. Attention is drawn to the fact that the work function of the metal depends on the dielectric constant $\tilde{\varepsilon}$ weighted average over the contact area.

If a metal droplet of area S is in the vapour phase with a constant ε_v, but touches a dielectric substrate with a constant ε (contact area αS, $\alpha < 1$), then the effective influence of the substrate and vapour, as follows from the Gauss theorem [43], is reduced to calculating the work function of the droplet in a homogeneous fictitious dielectric medium with constant

$$\tilde{\varepsilon} = \alpha\varepsilon + (1 - \alpha)\varepsilon_v . \tag{16}$$

A comparison of the results of fully self-consistent calculations in [44, 45] and partially self-consistent calculations in [41, 42] indicates that the results obtained for the surface energy in [41, 42] can be taken approximately as an 'upper' estimate. The calculation involves integration over the entire space, taking into account the complex behaviour of electron density and potential profiles, which the Ritz method is not capable of reproducing.

Taking into account the dielectric coating leads to a decrease in surface energy compared to a drop in a vacuum. For a drop suspended in a vapour, $\alpha = 0$, and the vapour constant ε_v can be estimated using the Clausius–Mossotti formula. Therefore, the surface tension of a droplet in a vacuum, a droplet on a dielectric substrate, and a droplet in dense vapour are different from each for σ_0.

Using the calculation scheme of the Ritz method and the trial function [41, 42], the values $\sigma_0(\tilde{\varepsilon})$ for Cs, Na, Mg, Pb, Au and Al were calculated (see Table 2).

Example: a drop of Pb on a substrate of amorphous carbon, for which $\varepsilon = 10$, and $\varepsilon_v = 1$ for vapour. Let the fraction of the surface touching the substrate is $\alpha = 1/10$. What is its surface energy now? Using (16), we obtain

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{1}{10}10 + \left(1 - \frac{1}{10}\right)1 = 1.9 ,$$

and, based on Table 2, we are guessing that $\sigma_0 \approx 614$ erg/cm^2. Compared to $\tilde{\varepsilon} = 1$ the decrease in surface energy was 14%. Apparently, such a significant decrease is weakly dependent on the capillary effect.

TABLE 2. The results of calculations $\sigma_0(\tilde{\varepsilon})$ (in erg/cm^2) for $\alpha = 1$.

$\tilde{\varepsilon}$	1	2	3	4	5	10
Cs (1)	66/79	63	62	62	62	61
Na (1)	178/191	167	163	161	159	157
Mg (2)	520/569	460	436	424	417	401
Pb (4)	714/465	603	560	537	523	493
Au (3)	858/1134	690	625	590	568	523
Al (3)	872/1160	698	630	593	570	522

Let us recall that such an estimate gives a somewhat overestimated effect of the dielectric coating.

Now consider a drop of Cs suspended in dense vapour ($\alpha = 0$) on the saturation line at $T = 1400$ K, when the vapour can still be considered as an ideal gas. Then, formula (16) gives $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_v$, and the Clausius–Mossotti formula gives $\varepsilon_v = 1.064$. Moreover, although the exact surface tension at such a temperature is unknown, calculations at $T = 0$ and such a value of $\tilde{\varepsilon}$ indicate an insignificant effect for this temperature.

4. CONCLUSIONS

In this work, the effective radii of the electron cloud for Cs, Na, Mg and Al were calculated using the stabilized jelly model from the asymptotic behaviour of the electric capacitance. The calculation results were used to analyse the size dependence of the surface tension of charged metal clusters. To comply with thermodynamic theory, in which atoms are points, it is obvious to refine the surface area of the cluster taking into account the finite sizes of atoms (their non-pointiness). The uncertainty of the boundary associated with the roughness of the atomic scale, as well as taking into account the effective radius of the electron cloud of the cluster, can lead to an inversion of the sign of the correction.

Contradictions arise not only when choosing a calculation method, but also in determining the area of the real surface and its local curvature, which may indicate that the accuracy of the model is exceeded in the absence of reliable experimental data. Therefore, in asymptotic, representing the total cluster energy in the form of an expansion in powers of $N^{-1/3}$, and not R^{-1} at least reduces the overall modelling error.

The influence of the environment on the surface energy of the droplet is estimated. Particular attention is paid to the influence of the dielectric substrate: the surface energy of the metal depends on the dielectric constant weighted average over the area of contact with the exter-

nal environment. Calculations were performed for Cs, Na, Mg, Pb, Au and Al. Contact of a drop with a dielectric substrate can lead to a significant decrease in surface energy.

REFERENCES

1. R. C. Tolman, *J. Chem. Phys.*, **17**, No. 3: 333 (1949).
2. J. G. Kirkwood and P. B. Buff, *J. Chem. Phys.*, **17**, No. 3: 338 (1949).
3. A. I. Rusanov, *Fazovyye Ravnovesiya i Poverkhnostnyye Yavleniya* [Phase Equilibria and Surface Phenomena] (Leningrad: Khimiya: 1967) (in Russian).
4. M. P. A. Fisher and M. Wortis, *Phys. Rev. B*, **29**, No. 11: 6252 (1984).
5. V. G. Baidakov and G. Sh. Boltachev, *Phys. Rev. E*, **59**, No. 1: 469 (1999).
6. J. W. P. Schmelzer, A. S. Abyzov, and V. G. Baidakov, *Entropy*, **21**: 670 (2019).
7. J. S. Rowlinson and B. Widom, *Molecular Theory of Capillarity* (Mineola, NY: Dover Publications: 2013).
8. S. Burian, M. Isaiev, K. Termentzidis, V. Sysoev, and L. Bulavin, *Phys. Rev. E*, **95**, No. 6: 062801 (2017).
9. S. W. Cui, J.-A. Wei, Q. Li, W.-W. Liu, P. Qian, and X. S. Wang, *Chinese Phys. B*, **30**, No. 1: 016801 (2021).
10. W. Vogelsberger, H.-G. Fritsche, and E. Müller, *Phys. Status Solidi (b)*, **148**, No. 1: 155 (1988).
11. H. Haberland, *Clusters of Atoms and Molecules. Theory, Experiment, and Clusters of Atoms* (Berlin: Springer: 1994).
12. N. T. Gladkikh, L. K. Griogryeva, S. V. Dukarov, V. E. Zilbervarg, V. I. Larin, E. L. Nagaev, and S. P. Chizhik, *Fizika Tverdogo Tela*, **31**, No. 5: 13 (1989) (in Russian).
13. E. L. Nagaev, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **162**, No. 9: 49 (1992) (in Russian).
14. L. M. Shcherbakov and V. M. Samsonov, *J. Surface Investigation. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, No. 3: 95 (1995) (in Russian).
15. J. L. Martins, R. Car, and J. Buttet, *Surf. Sci.*, **106**, Nos. 1–3: 265 (1981).
16. I. T. Iakubov, A. G. Khrapak, L. I. Podlubny, and V. V. Pogosov, *Solid State Commun.*, **53**, No. 4: 427 (1985).
17. J. P. Perdew, Y. Wang, and E. Engel, *Phys. Rev. Lett.*, **66**, No. 4: 508 (1991).
18. C. Fiolhas and J. P. Perdew, *Phys. Rev. B*, **45**, No. 11: 6207 (1992).
19. P. Ziesche, J. P. Perdew, and C. Fiolhais, *Phys. Rev. B*, **49**, No. 12: 7919 (1994).
20. V. V. Pogosov, *Chem. Phys. Lett.*, **193**, No. 6: 473 (1992).
21. V. V. Pogosov, *Solid State Commun.*, **89**, No. 12: 1017 (1994).
22. C. Hock, C. Bartels, S. Straßburg, M. Schmidt, H. Haberland, B. von Issendorff, and A. Aguado, *Phys. Rev. Lett.*, **102**, No. 4: 043401 (2009).
23. D. Vollath, F. D. Fischer, and D. Holec, *Beilstein J. Nanotechnol.*, **9**: 2265 (2018).
24. D. Holec, P. Dumitraschkewitz, D. Vollath, and F. D. Fischer, *Nanomaterials*, **10**, No. 3: 484 (2020).
25. P. Z. Pawlow, *Z. phys. Chem.*, **65U**, Iss. 1: 1, 545 (1909).
26. A. V. Korotun and V. V. Pogosov, *Phys. Solid State*, **63**, No. 1: 122 (2021).
27. M. Itoh, V. Kumar, and Y. Kawazoe, *Phys. Rev. B*, **73**, No. 3: 035425 (2006).
28. S. Ali, V. S. Myasnichenko, and E. C. Neyts, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **18**, Iss. 2: 792 (2016).

29. H. Haouas, L. El. Atouani, K. Sbiaai, and A. Hasnaoui, *Comput. Mater. Sci.*, **214**: 111695 (2022).
30. S. Polsterová, M. Friák, M. Všianská, and M. Šob, *Nanomaterials*, **10**, No. 4: 767 (2020).
31. R. W. Hasse and W. D. Myers, *Geometrical Relationships of Macroscopic Nuclear Physics* (Springer-Verlag: 1988).
32. W. A. de Heer, *Rev. Mod. Phys.*, **65**, No. 3: 611 (1993).
33. M. Brack, *Rev. Mod. Phys.*, **65**, No. 3: 677 (1993).
34. M. Seidl, J. P. Perdew, M. Brajczewska, and C. Fiolhais. *J. Chem. Phys.*, **108**, No. 19: 8182 (1998).
35. K. K. Nanda, *Phys. Lett. A*, **376**, No. 19: 1647 (2012).
36. V. V. Pogosov and V. I. Reva, *J. Chem. Phys.*, **148**, No. 4: 044105 (2018).
37. V. V. Pogosov and V. I. Reva, *Phys. Solid State*, **60**, No. 4: 634 (2018).
38. T. Gould, B. T. Liberles, and J. P. Perdew, *J. Chem. Phys.*, **152**, No. 5: 054105 (2020).
39. V. V. Pogosov and A. G. Khrapak, *Teplofizika Vysokikh Temperatur*, **26**, No. 2: 145 (1988) (in Russian).
40. V. Fortov, I. Iakubov, and A. Khrapak, *Physics of Strongly Coupled Plasma* (Oxford: Oxford Academic Books: 2006), ch. 4.
41. V. V. Pogosov, *Phys. Solid State*, **64**, No. 1: 121 (2022).
42. V. V. Pogosov, *Phys. Met. Metallogr.*, **123**, No. 1: 16 (2022).
43. V. V. Pogosov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 8: 935 (2023).
44. A. V. Babich and V. V. Pogosov, *Phys. Solid State*, **55**, No. 1: 196 (2013).
45. V. V. Pogosov, A. V. Babich, and P. V. Vakula, *Phys. Solid State*, **55**, No. 10: 2120 (2013).

Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2024, vol. 46, No. 4, pp. 301–311
https://doi.org/10.15407/mfint.46.04.0301
Reprints available directly from the publisher

© 2024 Publishing House 'Akademperiodyka',
National Academy of Sciences of Ukraine
Published by license under
the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics–
N.A.S. of Ukraine Publishers imprint.
Printed in Ukraine.

PACS numbers: 06.60.Vz, 52.77.Fv, 68.37.Hk, 68.47.Gh, 81.20.Vj, 81.30.Fb, 81.40.Ef

Physicochemical Principles of Spinel Formation during Electrode Arc Welding and Cladding Under Flux

N. M. Strelenko, V. L. Kovalenko, and R. V. Mastenko

National Technical University of Ukraine 'Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute',
37 Beresteiskyi Ave.,
UA-03056 Kyiv, Ukraine

The peculiarities of the process of forming complex compounds, namely, spinels, in flux-cored arc welding for the slag TiO_2–MnO–SiO_2–MgO–CaO–FeO–Al_2O_3 system are studied. An experimental investigation of the mechanism of spinel formation in conditions of electrode arc welding and cladding under flux is carried out. Based on the analysis of microimages of the slag surface obtained using scanning electron microscopy, the mechanism of spinel formation, namely, the growth of microcomplex compounds into macrospinels, is presented. The main stages and mechanism of formation of the complex compounds, namely, spinels, are described. As shown, the structure of spinels is determined by the temperature conditions of the crystallization of the slag melt. The study reveals that one of the determining factors of high-temperature separation of the slag crust during multilayer cladding with overlap of the previous layer is the formation of spinels at the interphase boundary between the slag and the metal. Based on modern ideas about the structure of slag melts, a mechanism for the formation of complex compounds at the interphase boundary between slag and metal is proposed. The main factor determining the process of high-temperature separation of the slag coating for the TiO_2–MnO–SiO_2–MgO–CaO–FeO–Al_2O_3 system is the formation of complex compounds based on spinel-forming elements and slag oxides at the interphase boundary between the slag and the metal.

Key words: flux-cored arc welding and cladding, agglomerated fluxes, slag crust, interphase boundary between slag and metal, slag oxidative potential, spinels, separation of the slag coating.

Corresponding author: Nataliya Mykhailivna Strelenko
E-mail: strelenkon@gmail.com

Citation: N. M. Strelenko, V. L. Kovalenko, and R. V. Mastenko, Physicochemical Principles of Spinel Formation during Electrode Arc Welding and Cladding Under Flux, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **46**, No. 4: 301–311 (2024). DOI: 10.15407/mfint.46.04.0301

Досліджено особливості процесу утворення комплексних з'єднань — шпінелей під час електродугового зварювання під флюсом для шлакової системи TiO_2–MnO–SiO_2–MgO–CaO–FeO–Al_2O_3. Проведено експериментальне дослідження механізму утворення комплексних з'єднань — шпінелей в умовах електродугового зварювання та натоплення під флюсом. На основі аналізи мікрозображень поверхні шлаку, яких одержано за допомогою растрової електронної мікроскопії, представлено механізм утворення шпінелей — переростання мікрокомплексних сполук у макрошпінелі. Наведено основні етапи та механізм утворення комплексних з'єднань — шпінелей. З'ясовано, що структура шпінелей визначається температурними умовами кристалізації шлакового розтопу. В роботі показано, що одним з визначальних чинників високотемпературної віддільности шлакової корки за багатошарового натоплення із перекриттям попереднього шару є утворення шпінелей на міжфазній межі шлак–метал. На основі сучасних уявлень про будову шлакових розтопів запропоновано механізм утворення комплексних з'єднань на міжфазній межі шлак–метал. Основним чинником, що визначає процес високотемпературного відділення шлакового покриття для системи TiO_2–MnO–SiO_2–MgO–CaO–FeO–Al_2O_3, є утворення на міжфазній межі шлак–метал комплексних з'єднань на основі шпінелетвірних елементів та оксидів шлаку.

Ключові слова: зварювання та натоплення під флюсом, аґломеровані флюси, шлакова корка, міжфазна межа шлак–метал, окисний потенціял шлаку, шпінелі, відокремлення шлакового покриття.

(Received 12 April, 2023; in final version, 15 June, 2023)

1. INTRODUCTION

In modern industrial production, there is an increasing use of repair welding of worn surfaces made of carbon and low-alloy steels in many industries. The technological conditions for welding such materials involve heating to 500–600°C, which usually leads to problems with separating the slag coating after welding. Existing materials for arc welding and flux-cored welding cannot provide guaranteed separation of the slag coating at temperatures above 250–300°C. This is particularly relevant for multilayer welding with overlapping of the previous layer, which can lead to a disruption of the technological process due to the flow of processes at the slag–metal interphase boundary determined by the physicochemical properties of the slag and the chemical composition of the weld metal.

Improving the technological characteristic of flux, such as high-temperature separation of the slag crust, would generally lead to significant economic benefits by ensuring the continuity of multilayer welding/repair of parts that require heating to 500–600°C. This would eliminate the technological operation of forced separation of the slag crust, reducing costs for eliminating defects from slag inclusions and reducing

the overall production time.

In the case of flux-cored welding/cladding, the interaction of the slag–metal phases at the interphase boundary of the tail part of the welding bath in the area where the formation of complex compounds (spinels) is possible, has been poorly studied. Accordingly, processes that result from the interaction of slag–metal and are determined by the mutual transition of individual elements at the interphase boundaries of the reaction zone of welding during automatic flux-cored welding, have been insufficiently studied. This is due to the complexity of conducting research accompanied by very high temperature gradients and sufficiently high crystallization rates. Traditional chemical analysis allows determining the composition of only the initial raw materials, but not the final product of the welding process. However, even such data are very scarce in the literature. Furthermore, there is a lack of data, which would characterize fully the relationship between the composition of the molten flux, the base metal of the weld, and the formation of spinels, which, in turn, worsen the high-temperature detachment of the slag crust.

To ensure guaranteed separation of the slag crust, all interrelated parameters that determine the process of slag crust separation must be taken into account: the physicochemical properties of the flux, welding and cladding regimes, chemical composition of welding materials and base metal. The separation of the slag crust depends on the physicochemical properties of the slag, such as the melting temperature of the slag, interfacial tension, and the temperature of slag crystallization. In turn, physicochemical properties are determined by oxidation processes at the slag–metal interface.

Control of oxidation processes is carried out by changing the ratio of flux components, which together with welding and cladding regimes affects the formation of the weld joint. In this work, the main attention is paid to the process of spinel formation, which is one of the main factors that affect the ease of slag crust detachment.

The ratio of welding material components can significantly affect the processes that occur at the slag–metal interface and, as a result, the concentration of certain alloying elements in different areas of the weld leads to a greater or lesser degree of local slag–metal adhesion, depending on the affinity of the elements to oxygen.

The guaranteed separation of slag crust is ensured by controlling parameters such as the difference in thermal expansion coefficients of the metal and slag and the probability of spinel formation.

One solution to this situation could be to study the algorithm of processes that occur at the slag–metal interphase boundary in the low-temperature part of the welding/melting reaction zone based on modern concepts of the ionic and molecular structure of slag melts to predict the formation of complex compounds—spinels.

The presence and composition of complex compounds (spinels) are determined by the reactions that occur at the interphase boundary, as well as the concentration and temperature conditions of the interacting metal and slag phases. The first factor is the temperature conditions for the formation of complex compounds, which are determined by the interaction of the solidified weld metal and the liquid slag. The temperature range is limited by the metal crystallization temperature (1500–1400°C) and the slag-crust solidification temperature. During slag solidification, the following processes occur: the transformation of the liquid slag solution into a solid solution, the release of complex compounds from the liquid and solid solutions, and chemical interaction at the slag–metal interphase boundary.

When the solid solution forms, it can have a glassy or amorphous structure. The process of converting liquid slag into a solid solution is accompanied by the release of certain complexes of complex oxides. Such compounds may be chemically neutral to the solution or interact with it. In the first case, no chemical reactions occur at the slag–metal boundary, in the second case, the slag may grow on the metal surface as a result of the chemical interaction of the slags' complex compounds with the surface of the weld metal [1].

The adhesion of the slag crust to the metal surface is carried out through a thin layer formed at the boundary between the slag–metal system (Fig. 1) and depends on its chemical composition. The more metal oxides form complex compounds with slag oxides on the boundary in a thin layer, the worse the separation becomes.

This is related to the fact that reactions at the slag–metal interface

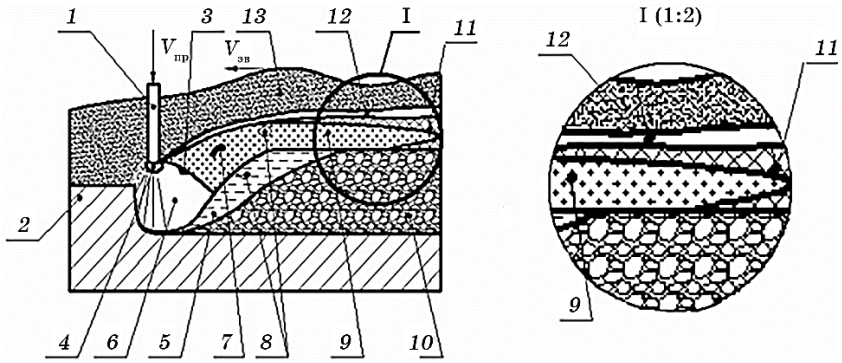


Fig. 1. Diagram of flux-cored arc welding and cladding, where *1*—welding wire, *2*—base metal, *3*—droplets on the surface of the slag dome, *4*—droplet, *5*—liquid metal of the weld pool, *6*—gas phase, *7*—metal droplets in the slag, *8*—gas bubbles, *9*—liquid slag, *10*—weld (*9–10*—interphase boundary slag–metal in the tail part of the reaction zone of welding), *11*—slag crust, *12*—semi-molten grains of flux, *13*—flux.

occur in the back part of the welding reaction zone, where the flux is transformed into liquid slag, which covers the surface of the metal and can remain liquid for some time after the metal has already solidified. Accordingly, this affects the formation of the transition layer between the metal and slag, which increases the probability of spinel formation.

The presence of slag residues after separation of the slag crust is related to the physicochemical interaction between the slag and metal, which forms an intermediate slag layer with a crystalline lattice that promotes the growth of slag on the surface of the melted metal. The concentration of certain alloying elements in specific areas of the weld leads to a greater or lesser degree of local adhesion of the slag to the metal, depending on the affinity of the elements to oxygen. According to existing ideas, the distribution of adhesion forces between the slag coating and metal has an uneven character.

Regulating the process of separating the slag crust during welding and cladding can be based on predicting the physicochemical properties of slag melts, including reactions at the slag–metal interface. The nature and characteristics of these reactions are determined by the time of existence of the metal and slag melts, their concentration conditions, and the activity of components. Therefore, the possibility of controlling the process of separating the slag crust from the surface of the weld metal under flux by predicting changes in the physicochemical properties of the slag melt, including its temperature range of crystallization and controlled changes in the activity of participants in reactions at the slag–metal interface, is most likely achievable.

The chemically active structural elements of a slag melt are spinels. From a chemical point of view, spinels (from 'German Spinell') are a group of minerals of the class of complex oxides that have a general formula of AB_2O_4 or $A(A, B)O_4$, where A—Mg, Zn, Mn, Fe, Co, Ni and B—Al, Fe, Cr, Mn, Ti, V [1]. Spinel is a system of solid solutions with a well-developed isomorphism of cations A and B. Their formation process is associated with crystal growth. Chemical compounds formed on the basis of oxygen at the slag–metal interphase boundary, depending on the concentration conditions of the presence of cations A or B and oxygen anions, can lead to the formation of different types of spinels. Spinels crystallize in the form of octahedral and tetrahedral compounds. Based on existing ideas in chemistry, the elementary structure of spinels has 32 oxygen anions, which form a dense cubic packing with 64 tetrahedral vacancies (8 cations occupied) and 32 octahedral vacancies (16 cations occupied) [2]. Dense packing of oxygen in spinels is also noted in the theory of nanoscale components of a slag melt and complex compounds of elementary particles [2]. This explains the high chemical and thermal stability characteristic of all types of spinels. Spinels are characterized by high-temperature formation conditions of 1920–1400°C, which correlate with the temperature interval of the formation

of the crystalline phase of spinels [3, 4]. The main difference in the mechanism of spinel formation during welding and surfacing is the presence of a metallic component at the interphase boundary. This leads to the fact that conducting a direct analogy with the processes considered in the theory of spinel formation as chemical mineralogical compounds is impossible. In the conditions of welding, in addition to the concentration conditions, which significantly differ at the slag–metal boundary, the difference in the thermophysical properties of the slag and metal has a significant impact on the process of spinel formation. The result of this is the presence of a process of bonding a slag crust with the metal of the weld, and as a result, the influence of the peculiarities of spinel formation on the separation of slag, which is confirmed by experimental data on the separation of slag coating during surfacing, as well as the chemical composition of complex compounds that arise on the surface of the weld metal [3, 4].

2. EXPERIMENTAL PROCEDURE

The purpose of this work was to investigate experimentally the mechanism of complex compound formation (spinels) under conditions of flux-cored arc welding and cladding.

Special agglomerated fluxes (SAF) SAF-2 and SAF-3 of a TiO_2–MnO–SiO_2–MgO–CaO–FeO–Al_2O_3 slag system with a low content of CaO, FeO, and K_2O were produced for the research. The selection of this slag system was determined by the inclusion of elements that should affect the process of spinel formation. The presence of CaO, FeO, and K_2O oxides as a result of impurities in the raw materials used

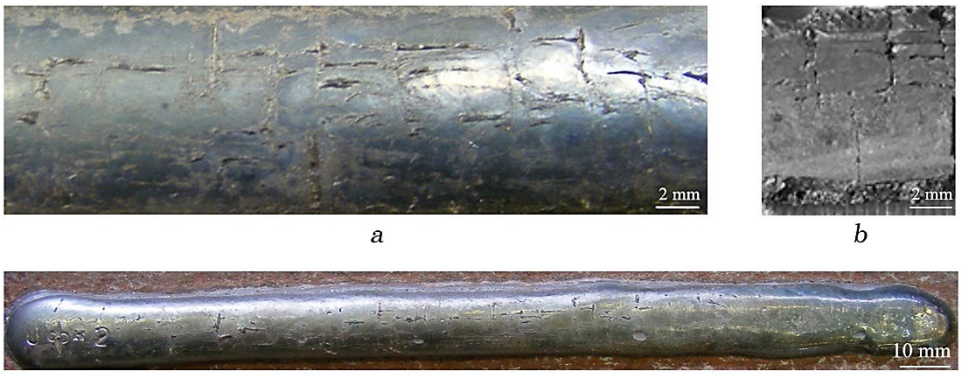


Fig. 2. Shows an image of the weld (*c*), a magnified fragment of the weld surface (*a*), and a slag crust (*b*) under the flux SAF-2 slag system TiO_2–MnO–SiO_2–MgO–CaO–FeO–Al_2O_3.

in flux production technology, and the presence of SiO_2 oxide was due to the need to ensure the fluxes-forming ability. To change the fluxes-oxidation potential, the MgO to TiO_2 ratio was varied in the flux composition. For SAF-2 flux, it was of 0.45, for SAF-3, it was of 1.0. The content of other components was kept unchanged whenever possible.

Under experimental fluxes SAF-2 and SAF-3, samples of the Sv-08G1NMA wire with a diameter of 3 mm were welded. The welding parameters were constant direct current, I = 420–450 A, V = 34–36 m/s, U = 32–36 V [5, 6]. After welding, non-metallic macroinclusions (macrospinels) on the weld metal surface, slag crust, and microinclusions on the slag surface were investigated. The study of macroobjects was carried out using digital photography. The slag microstructure was studied using scanning electron microscopy at magnifications of 250–1570 times.

It was found that macroinclusions are present on the surface of welded joints, the shape of which depends on the MgO to TiO_2 ratio. For the SAF-2 flux, the shape of macroinclusions is longitudinal, and for the SAF-3 flux, it is point-like (Fig. 2, *a*–*c*). The sizes of longitudinal macroinclusions are as follow: thickness of ≅ 0.1–0.3 mm, length of ≅ 2–7 mm; for point-like ones: diameter of ≅ 0.05–0.012 mm. The location of macroinclusions: for the SAF-2 flux, the main part is located in the centre of the joint in the welding direction and perpendicular to the axis of the joint (Fig. 2, *a*, *c*).

For the SAF-3 flux, macroinclusions have a localized character and are present in certain areas of the welded joint. The macroinclusions are distributed chaotically along the length of the weld joint, practically along its entire length (Fig. 3, *a*, *c*).

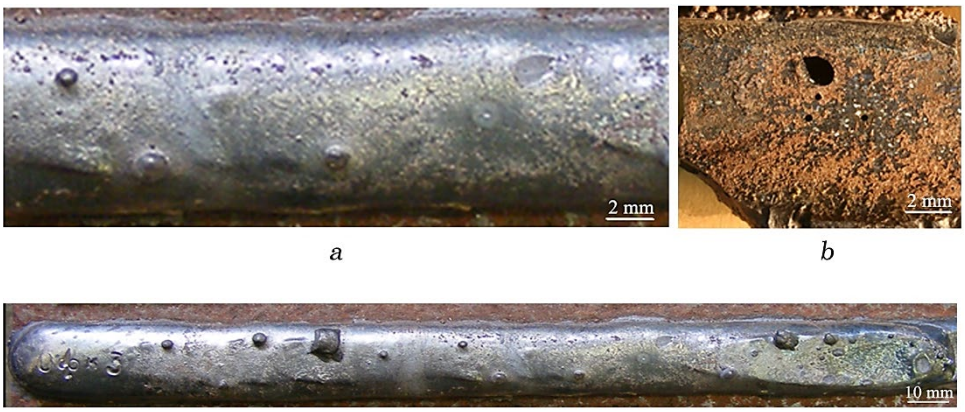


Fig. 3. Image of the weld (*c*), enlarged fragment of the weld surface (*a*), and slag crust (*b*) under the SAF-2 flux of the TiO_2–MnO–SiO_2–MgO–CaO–FeO–Al_2O_3 slag system.

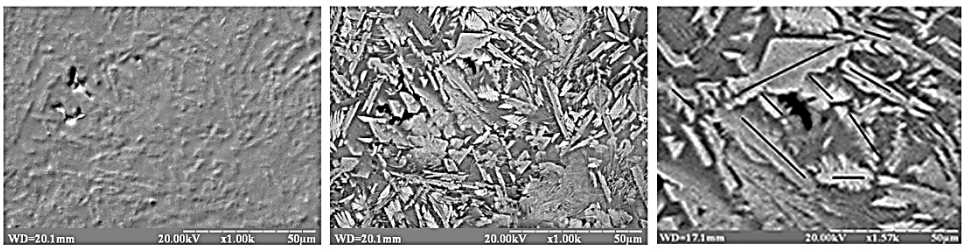
Photographs of the slag (Figs. 2, *b* and 3, *b*) show that the macroinclusions on the weld joints and their reflections on the slag crust coincide in location, size, and are quite voluminous.

Taking into account that macroinclusions have a volumetric shape and their traces are present on both the metal and the slag (Fig. 2 and 3), and that the chemical interaction between the metal and the slag can only occur when there are common compounds, it can be assumed that the obtained macroinclusions have a spinel-like character, which is confirmed by their chemical composition. The next stage of the study was to determine the structural components of the surface of the slag crust using scanning electron microscopy (SEM). To do this, samples of the slag crust were cut out with a size of 5×5 mm. The surface of the slag that borders the metal of the weld was examined.

Based on the analysis of the SEM data of the slag surface coating, it was found that for SAF-2 flux, the crystals that form when the slag cools down are on a common base and are evenly distributed (Fig. 4, *a*, *b*). The crystals have the form of irregular polygons with a length of 2–25 microns and a width of 1–5 microns and are separated by a base, on which they are located. Larger microconnectors of a round shape with irregular edges measuring 15–30 microns are also observed, which represent polygons that have grown together. Visual analysis of the microimage of the slag crust surface shows that the crystals are oriented in perpendicular directions (Fig. 4, *d*), which means that the arrangement of micro- and macrospinels (Fig. 2, *a*) coincides. This allows us to assume that micropolygons grow into macroinclusions.

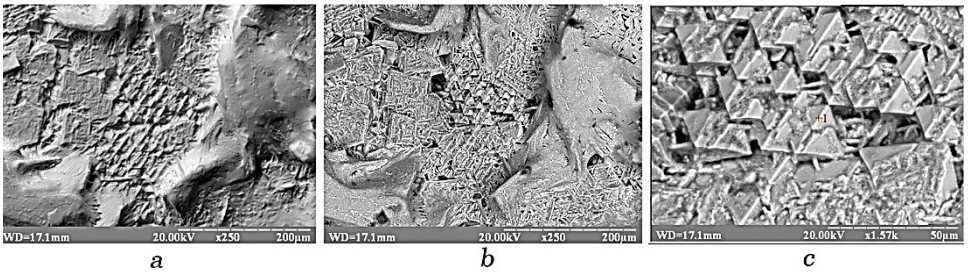
Based on SEM analysis, a visual and chemical analysis of the slag showed that microconnections of the following composition are locally located on the surface of the slag crust: SiO_2 (5–10%), TiO_2 (40–70%), MnO (20–40%), MgO (0.4–0.9%), FeO (1–3%), CaO (2–3%). Known features of the structure of complex compounds, such as spinels, and data obtained on the chemical composition of microconnections, allow us to assert that the microinclusions on the surface of the slag are spinels.

The analysis of microimages of the slag obtained under SAF-3 flux



a *b* *c*

Fig. 4. Microphotographs of the slag surface at different depths of focus (*a*, *b*) and the orientation of the crystals on the surface of the slag coating (*c*).



a *b* *c*

Fig. 5. Micrograph of the surface of the slag at different focusing depths (*a, b*) and orientation of pyramidal-shaped crystals on the surface of the slag coating (*c*).

showed significant heterogeneity of the coating (Fig. 5, *a, b*). Crystals that form during slag cooling are grouped in certain areas and are characterized by significant unevenness in height (Fig. 5, *a, b*). Visually, areas consisting of pyramid-shaped crystals (Fig. 5, *c*) of the same orientation and size of 4.5–7.5 μm are observed. The chemical composition of the areas and their appearance during macro- and microvisual analysis show that macroconnections on the surface of the weld metal are the result of the overgrowth of pyramid-shaped microspinels into macrospinels, as is the case with the overgrowth of polygons for SAF-2 flux.

Data from visual analysis of micro- and macrospinels and their chemical composition (Fig. 6) allows us to conclude that macrospinels are an extension of microspinels, the shape of which depends on the ratio of MgO and TiO_2 oxides, *i.e.*, on the slags' oxidation potential.

It has been established that there are three main interrelated factors, which determine the separation process: chemical bonding metal, slag, and physical adhesion in the presence of a similar lattice, which can occur simultaneously but have different nature.

The theory of the structure of slag melt based on theories of nanomicelles and complex molecules formed on the basis of oxygen is more advanced and can be applied to explain and predict processes in slag

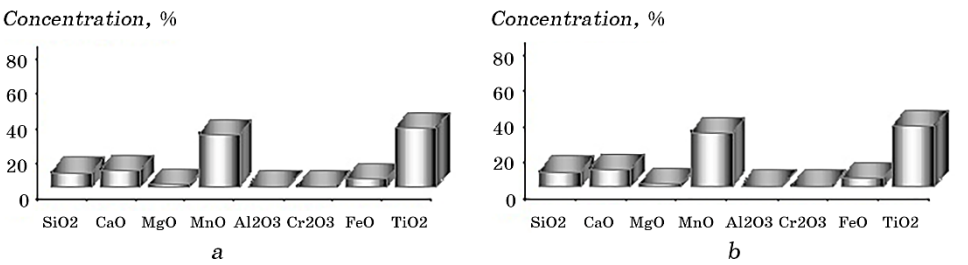


Fig. 6. Concentration of oxides in spinels during surfacing with flux SAF-2 (*a*) and SAF-3 (*b*) according to the chemical analysis based on SEM.

melt and at the interphase boundary, provided that the existing crystalline forms of octahedral and tetrahedral compounds formed during slag and metal crystallization are taken into account.

The mechanism of spinel formation has been elucidated, which consists of the following stages: the occurrence of chemical reactions to form microspinels in the form of complex compounds at the interphase boundary of liquid slag and metal in the temperature range of 1450–1350°C; the appearance of a crystalline phase at the boundary of interacting phases; the transition of microspinels to macrospinels at 1350–1100°C with adhesion of the metal surface seam to the slag coating. As a result of the mechanism of spinel formation during arc welding and flux-cored arc welding, complex compounds (spinels) are formed at the slag–metal interfacial boundary during the formation of slag coatings and in the presence of spinel-forming elements in microvolumes as a result of chemical reactions. The dense packing of oxygen in spinels, which corresponds to the structure of nanomicelles that are components of oxide slag melts, leads to the merging of microspinels, which can grow into macroformations. The oxidation potential of the slag, which is determined by the flux composition, has the main influence on these processes in the presence of spinel-forming elements.

Based on the obtained research results, final testing is currently underway for an innovative welding flux that allows for self-separation of the slag crust, which manifests immediately after the welding process. The slag crust self-detaches from the seam with the 'self-jumping' effect, which simplifies the work of welders and eliminates the labour-intensive operation of manual cleaning/separation of the slag crust from the seam, reducing the likelihood of slag inclusions during multipass/multilayer welding/cladding.

3. CONCLUSIONS

From the list of related parameters that determine the process of high-temperature separation of slag crust, the physicochemical process of spinel formation at the interphase boundary between liquid slag and solid metal of the seam was investigated.

As a result of the research, the mechanism of spinel formation during flux-cored arc welding and cladding of low- and medium-alloy steels was demonstrated.

The main structurally dependent connections that affect the conditions of interaction at the slag–metal interphase boundary were identified.

It was established that in the presence of spinel-forming elements at the slag–metal boundary, the formation of crystallization centres occurs, which are characterized by spinels that subsequently grow into macrospinels.

Based on modern concepts of the structure of slag melts, a mechanism for the formation of complex compounds at the slag–metal interphase boundary with the growth of microcomplex compounds into macrospinels is proposed. The external appearance of the slag crust structure, obtained using SEM, indicates that for the SAF-2 flux, spinels have a larger size (up to 25 microns) than for the SAF-3 flux (up to 10 microns). This leads to the growth of microspinels into macrospinels for the SAF-3 flux. The shape and structure of these aggregates are determined by the oxidizing potential of the slag.

REFERENCES

1. L. A. Zhdanov, V. L. Kovalenko, N. M. Strelenko, and E. P. Chvertko, *Soldagem & Inspeção*, No. 18: 314 (2013) (in Brazil).
2. N. M. Strelenko, L. A. Zhdanov, and K. O. Zvorykin, *Tekhnologicheskie Sistemy*, **47**, No. 3: 77 (2009) (in Ukrainian).
3. N. M. Strelenko, L. A. Zhdanov, and K. O. Zvorykin, *Tekhnologicheskie Sistemy*, **51**, No. 2: 83 (2010) (in Ukrainian).
4. L. A. Zhdanov and N. M. Strelenko, *Bulletin of Kyiv Polytechnic Institute. Series Mechanical Engineering*, **61**, No. 2: 123 (2011) (in Ukrainian).
5. L. A. Zhdanov, V. L. Kovalenko, V. T. Kotyk, and K. O. Zvorykyn, *Tekhnologicheskie Sistemy*, **28**, No. 2: 65 (2005) (in Ukrainian).
6. V. L. Kovalenko, R. V. Mastenko, N. M. Strelenko, and C. O. Zvorykin, *Tekhnologicheskie Sistemy*, **80**, No. 3: 56 (2017) (in Ukrainian).

Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2024, vol. 46, No. 4, pp. 313–324
https://doi.org/10.15407/mfint.46.04.0313
Reprints available directly from the publisher

© 2024 G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Published by license under
the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics–
N.A.S. of Ukraine Publishers imprint.
Printed in Ukraine.

PACS numbers: 62.20.Qp ,68.35.Ct, 68.55.Ln, 81.15.Rs, 81.40.Pq, 81.65.Lp

Поліпшення показників якости поверхневих шарів крицевих деталів після алюмінування електроіскровим леґуванням. Ч. 2. Результати впливу продуктивности алюмінування електроіскровим леґуванням на структурний стан крицевих поверхонь

О. П. Гапонова, В. Б. Тарельник*, Т. І. Жиленко, Н. В. Тарельник*, О. А. Василенко*, С. В. Павловский*

Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2,
40007 Суми, Україна
**Сумський національний аграрний університет,*
вул. Герасима Кондратьєва, 160,
40021 Суми, Україна

В статті проводили дослідження другого етапу алюмінування, коли на поверхню, що зазнала алюмінування на першому етапі, перед подальшим електроіскровим леґуванням алюмінійовою електродою наносять консистентну речовину, яка містить алюмінійову пудру (перший варіянт) або графітовий порошок і алюмінійову пудру (другий варіянт), після чого, не чекаючи висихання консистентної речовини, проводять процес алюмінування за енергії розряду у 0,52–2,6 Дж і продуктивности у 1,0–2,0 см^2/хв.; енергію розряду і продуктивність обирають такими, що шерсткість поверхні зменшується у ≅ 3–4 рази. За алюмінування на другому етапі для обох варіянтів із

Corresponding author: Oksana Petrivna Gaponova
E-mail: gaponova@pmtkm.sumdu.edu.ua

Sumy State University,
2 Rymsky-Korsakov Str., UA-40007 Sumy, Ukraine
**Sumy National Agrarian University,*
160 Gerasym Kondratiev Str., UA-40021 Sumy, Ukraine

Citation: O. P. Gaponova, V. B. Tarelnyk, T. I. Zhylenko, N. V. Tarelnyk, O. O.Vasilenko, S. V. Pavlovskyi, Improvement of the Quality Parameters of the Surface Layers of Steel Parts after Aluminizing by Electrospark Alloying. Pt. 2. Results of the Influence of the Productivity of Aluminizing by Electrospark Alloying on the Structural State of Steel Surfaces, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **46**, No. 4: 313–324 (2024) (in Ukrainian). DOI: 10.15407/mfint.46.04.0313

використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру або алюмінійову пудру та порошок графіту, збільшується мікротвердість «білого шару» та дифузійної зони (в більшому ступені за наявности у консистентній речовині графіту), шерсткість поверхні зменшується, а суцільність покриття становить 100%. До практичної реалізації рекомендується проводити процес алюмінування за першим варіянтом з енергією розряду $Wp = 4{,}6–6{,}8$ Дж із використанням на другому етапі консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру та порошок графіту.

Ключові слова: електроіскрове леґування, алюмінування, продуктивність, поверхневий шар, якість, структура, шерсткість, мікротвердість, товщина «білого шару», суцільність покриття.

In the article, investigation is carried out at the second stage of aluminizing, when a consistent substance containing aluminium powder (the first option) or graphite powder and aluminium powder (the second option) is applied to the surface that has undergone aluminizing at the first stage, before further electrospark alloying with an aluminium electrode, and, regardless of the drying of the consistent substance, the aluminizing process is carried out at a discharge energy of 0.52–2.6 J and a productivity of 1.0–2.0 cm^2/min, while the discharge energy and productivity are chosen such that the surface roughness decreases by ≅ 3–4 times. At the second stage aluminizing for both options, when using a consistent substance that contains aluminium powder or aluminium powder and graphite powder, the microhardness of the 'white layer' and the diffusion zone are increased (to a greater degree when graphite is present in the consistent substance), the surface roughness is decreased, and the integrity of the coating is of 100%. Before practical implementation, it is recommended to carry out the aluminizing process according to the first option at the discharge energy $Wp = 4.6–6.8$ J, using a consistent substance containing aluminium powder and graphite powder at the second stage.

Key words: electrospark alloying, aluminizing, productivity, surface layer, quality, structure, roughness, microhardness, thickness of the 'white layer', coating continuity.

(Отримано 30 травня 2023 р.; остаточн. варіянт — 25 липня 2023 р.)

1. ВСТУП

В першій частині статті [1] було проведено аналізу структуроутворення та властивостей поверхневих шарів деталів з криці після алюмінування традиційними технологіями [2–5] і методою електроіскрового леґування (ЕІЛ) [6–8]. Із розглядом проблеми підвищення технології алюмінування методою ЕІЛ показано, що якість поверхневих шарів за ЕІЛ має ряд переваг перед іншими технологіями [9, 10], але має й недоліки [11], які можна усунути за рахунок подальшої поверхневої деформації (ППД) [12, 13] або через нанесення металополімерних матеріялів [14, 15]. Водночас виявлено

резерви для підвищення параметрів якости поверхневих шарів деталів з криці за алюмінування за рахунок зміни продуктивности процесу ЕІЛ алюмінійовою електродою-інструментом, яка є одним із важливих режимних параметрів технології алюмінування.

В першій частині роботи досліджували два варіянти зменшення продуктивности по відношенню до вказаної в табл. 1 роботи [1]. В таблиці 2 роботи [1] представлено дані цих варіянтів: перший, коли продуктивність було зменшено ≅ в два рази; другий, коли продуктивність було зменшено ≅ в чотири рази. Кожний з варіянтів виконували в два етапи.

В першій частині роботи досліджували перший етап обох варіянтів, коли оброблення поверхневого шару зразків криці 20 і криці 40 проводять алюмінійовою електродою за енергії розряду $Wp = 0{,}52$–$6{,}8$ Дж і продуктивности згідно з табл. 2 [1].

В результаті проведених досліджень впливу продуктивности процесу ЕІЛ алюмінійовою електродою-інструментом на параметри якости поверхневих шарів деталів з криці удосконалено технологію їхнього алюмінування. Водночас встановлено:

у варіянті 1 із зростанням енергії розряду з 0,52 до 6,8 Дж на першому етапі алюмінування криці 20 і криці 40: товщина «білого» шару збільшується, відповідно, з 20 до 75 і з 25 до 110 мкм, а товщина дифузійної зони з 35 до 120 і з 40 до 140 мкм; мікротвердість «білого шару» зростає з 2200 до 7400 і з 2400 до 7450 МПа; шерсткість поверхні Ra зростає з 1,1 до 9,0 і з 1,0 до 8,1 мкм відповідно, а суцільність зростає з 80 до 100%, починаючи з $Wp = 4{,}6$ Дж, і з 60 до 100% за $Wp = 6{,}8$ Дж;

у варіянті 2 із зростанням енергії розряду з 0,52 до 6,8 Дж на першому етапі оброблення криці 20 і криці 40: товщина «білого» шару збільшується для криці 20 з 25 до 60 мкм за $Wp = 4{,}6$ Дж, а потім не змінюється, а для криці 40 — з 30 до 100 мкм; товщина дифузійної зони змінюється з 45 до 130 відповідно; мікротвердість «білого шару» зростає з 2250 до 7300 і з 2450 до 7300 МПа; шерсткість поверхні Ra зростає з 1,3 до 9,0 і з 1,6 до 8,1 мкм відповідно, а суцільність, як для криці 20, так і для криці 40, за $Wp = 0{,}52$ Дж складає 95% і далі підвищується до 100%.

Таким чином, зменшення продуктивности в другому варіянті сприяє погіршенню параметрів якости покриттів.

З метою забезпечення високих параметрів якости покриттів нами запропоновано нову технологію алюмінування, яка полягає у наступному. На другому етапі алюмінування на поверхню, що зазнала алюмінування на першому етапі (обох варіянтів), перед подальшим ЕІЛ алюмінійовою електродою наносять консистентну речовину, яка містить алюмінійову пудру або графітовий порошок і алюмінійову пудру, після чого, не чекаючи висихання консистентної речовини, проводять процес алюмінування за енергії розряду у 0,52–

2,6 Дж і продуктивности у 0,5–0,7 см^2/хв.; водночас енергію розряду та продуктивність обирають такими, за яких шерсткість поверхні зменшується в ≅ 3–4 рази.

Цей етап можна реалізувати двома варіянтами.

1-й варіянт другого етапу. На другому етапі на поверхню, що зазнала алюмінування на першому етапі, після нанесення консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру проводили подальше ЕІЛ алюмінійовою електродою за енергії розряду у 0,52–2,6 Дж і продуктивности у 0,5–0,7 см^2/хв. Як показали попередні дослідження [6–8], алюмінійова пудра заповнює всі мікронерівності шерсткости поверхні, яку було одержано після алюмінування на першому етапі. На другому етапі алюмінування процес ЕІЛ відбувався між торцевою поверхнею алюмінійової електроди-інструменту (анодою) та виступами шерсткости поверхні, залишеними після першого етапу алюмінування (катодою), а також алюмінійовою пудрою, що знаходилася між цими виступами. Водночас виступи шерсткости деформувалися, розтоплялися разом з алюмінійовою пудрою та частково розтікалися, заповнюючи западини, мікропори й інші недосконалості поверхні, що піддаються обробленню. В результаті шерсткість поверхні понижується.

2-й варіянт другого етапу. На другому етапі на поверхню, що зазнала алюмінування на першому етапі, після нанесення консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру та порошок графіту, проводили подальше ЕІЛ алюмінійовою електродою за енергії розряду у 0,52–2,6 Дж і продуктивности у 0,5–0,7 см^2/хв. Алюмінійова пудра та порошок графіту заповнювали всі мікронерівності шерсткости поверхні, яку було одержано після алюмінування на першому етапі. На другому етапі алюмінування процес ЕІЛ відбувався між торцевою поверхнею алюмінійової електроди-інструменту (анодою) та виступами шерсткости поверхні, залишеними після першого етапу алюмінування (катодою), а також алюмінійовою пудрою та порошком графіту, що знаходилися між цими виступами. Водночас виступи шерсткости деформувалися, розтоплялися разом із алюмінійовою пудрою та частково розтікалися, заповнюючи западини, мікропори й інші недосконалості поверхні, що алюмінують. Водночас шерсткість поверхні понижується. В результаті контактування торцю алюміні-

ТАБЛИЦЯ 1. Залежність продуктивности ЕІЛ від енергії розряду на другому етапі алюмінування.

TABLE 1. The dependence of the ESA productivity from the energy to the discharge at the second stage of aluminizing.

Енергія розряду Wp, Дж	0,52	1,3	2,6
Продуктивність, см^2/хв.	0,5–0,6	0,6–0,7	0,8–1,0

йової електроди-інструменту з порошком графіту в поверхневому шарі підвищується мікротвердість «білого» шару, що є результатом процесів, пов'язаних із гартівними процесами та фазоутворенням.

В таблиці 1 представлено енергію розряду та продуктивність на другому етапі алюмінування.

2. РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ

На рисунку 1 показано структури (*а* і *б*) і розподіл мікротвердости

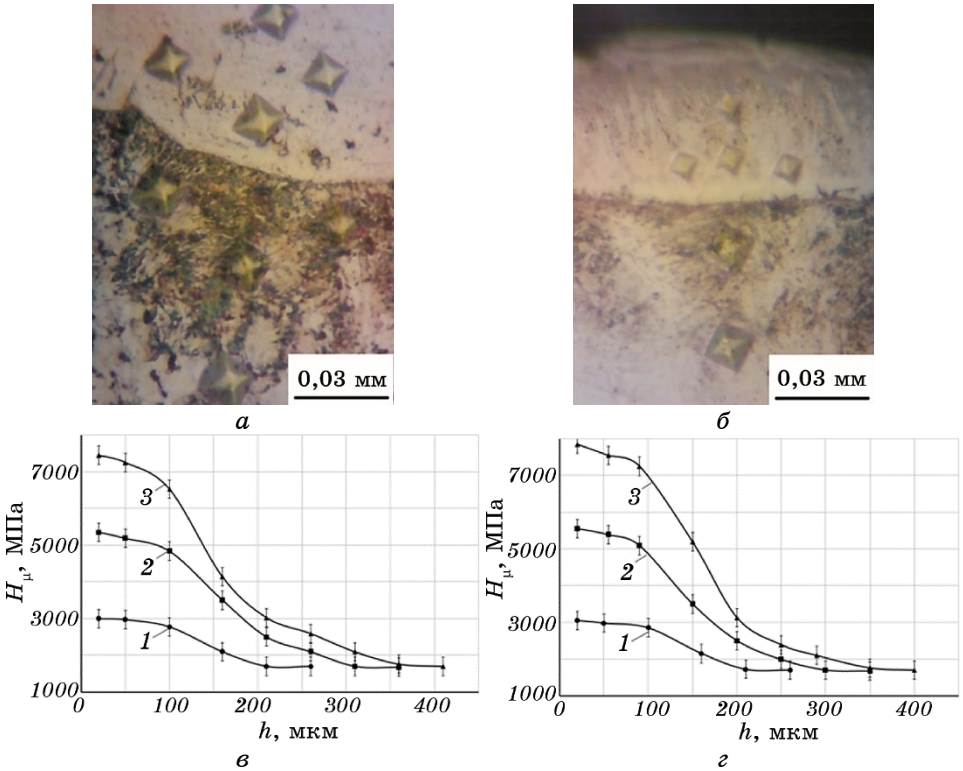


Рис. 1. Структури (*а* і *б*) і розподіл мікротвердости в поверхневому шарі криці 20 (*в* і *г*) після алітування на другому етапі з використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру (*а*, *в*) й алюмінійову пудру та порошок графіту (*б*, *г*) за алітування на першому етапі й енергії розряду $Wp = 2{,}6$, 4,6 і 6,8 Дж.

Fig. 1. Structures (*a* and *б*) and the difference in microhardness in the surface ball of steel 20 (*в* and *г*) after aluminizing at another stage from victorious consistency speech, so, as to brush aluminium powder (*a*, *в*) or aluminium powder and graphite powder (*б*, *г*) with aluminizing at the first stage and energy category $Wp = 2.6$, 4.6 and 6.8 J.

(*в*, *г*) в поверхневому шарі криці 20 після алюмінування на другому етапі з використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру (*а*, *в*) й алюмінійову пудру та порошок графіту (*б*, *г*) за енергій розряду $Wp = 2{,}6$, 4,6 і 6,8 Дж.

Електроіскрове покриття складається із зовнішнього «білого» шару, дифузійної зони й основи з ферито-перлітною структурою криці 20. Як показали дослідження, застосовування нової технології уможливлює одержати покриття із суцільністю у 100% і товщиною до 85 мкм. З використанням порошку графіту на другому етапі алю-

ТАБЛИЦЯ 2. Якісні параметри поверхневих шарів зразків криці 20 після ЕІЛ алюмінійовою електродою з використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру (перший варіянт) і алюмінійову пудру та порошок графіту (другий варіянт), за умов, коли продуктивність було зменшено ≅ в два рази.

TABLE 2. Qualitative parameters of the surface layers of steel 20 samples after ESA with an aluminium electrode using a consistent substance that contains aluminium powder (the first option) or aluminium powder and graphite powder (the second option) under the conditions, when the performance was reduced by ≅ two times.

Режим	Продуктивність, см²/хв.	Товщина, мкм		Максимальна мікротвердість, МПа		Шерсткість, мкм			Суцільність «білого» шару, %
		«білого» шару	перехідної зони	«білого» шару	перехідної зони	*Ra*	*Rz*	R_{max}	
Криця 20 (перший варіянт)									
I. ЕІЛ Al $Wp = 2{,}60$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 0{,}52$ Дж	0,8 0,5	До 65	До 65	3000 (±20)	2100 (±200)	1,2	2,3	5,6	100
I. ЕІЛ Al $Wp = 4{,}60$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 0{,}52$ Дж	1,0 0,6	До 75	До 80	5350 (±20)	2100 (±200)	1,7	2,8	6,9	100
I. ЕІЛ Al $Wp = 6{,}8$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 1{,}30$ Дж	1,5 0,8	До 85	До 130	7450 (±20)	2450 (±70)	2,5	6,9	9,4	100
Криця 20 (другий варіянт)									
I. ЕІЛ Al $Wp = 2{,}60$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 0{,}52$ Дж	0,8 0,5	До 70	До 60	3050 (±20)	2050 (±50)	1,3	2,3	5,3	100
I. ЕІЛ Al $Wp = 4{,}60$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 0{,}52$ Дж	1,0 0,6	До 75	До 80	5550 (±20)	2100 (±50)	1,7	2,7	6,2	100
I. ЕІЛ Al $Wp = 6{,}8$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 1{,}3$ Дж	1,5 0,8	До 75	До 100	7850 (±20)	2250 (±50)	2,7	6,7	9,1	100

мінування, очевидно, відбуваються процеси насичення поверхні Карбоном, і мікротвердість поверхневих шарів і дифузійної зони зростає (табл. 2).

В таблиці 2 зведено результати дослідження згідно з першим варіянтом алюмінування криці 20 (продуктивність було зменшено ≅ в два рази) із використанням на другому етапі консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру (перший варіянт) і алюмінійову пудру та порошок графіту (другий варіянт), за енергії розряду $Wp = 2{,}6$, 4,6 і 6,8 Дж на першому етапі леґування.

ТАБЛИЦЯ 3. Якісні параметри поверхневих шарів зразків криці 20 після ЕІЛ алюмінійовою електродою з використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру (перший варіянт) і алюмінійову пудру та порошок графіту (другий варіянт), за умов, коли продуктивність було зменшено ≅ в чотири рази.

TABLE 3. Qualitative parameters of the surface layers of steel 20 samples after ESA with an aluminium electrode using a consistent substance containing aluminium powder (the first option) and aluminium powder and graphite powder (the second option) under conditions, where the performance was reduced by ≅ four times.

Режим	Продуктивність, см²/хв.	Товщина, мкм		Максимальна мікротвердість, МПа		Шерсткість, мкм			Суцільність «білого» шару, %
		«білого» шару	перехідної зони	«білого» шару	перехідної зони	*Ra*	*Rz*	R_{max}	
Криця 20 (перший варіянт)									
I. ЕІЛ Al $Wp = 2{,}60$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 0{,}52$ Дж	0,4 0,2	До 55	До 55	3300 (± 20)	2150 (± 200)	1,2	2,1	5,2	100
I. ЕІЛ Al $Wp = 4{,}60$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 0{,}52$ Дж	0,5 0,2	До 65	До 90	5600 (± 50)	2400 (± 100)	1,4	2,3	5,9	100
I. ЕІЛ Al $Wp = 6{,}8$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 1{,}30$ Дж	0,6 0,3	До 75	До 130	7500 (± 20)	2550 (± 70)	2,3	6,1	8,4	100
Криця 20 (другий варіянт)									
I. ЕІЛ Al $Wp = 2{,}60$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 0{,}52$ Дж	0,4 0,2	До 65	До 60	3050 (± 20)	2050 (± 50)	1,3	2,3	5,3	100
I. ЕІЛ Al $Wp = 4{,}60$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 0{,}52$ Дж	0,5 0,2	До 65	До 95	5600 (± 20)	2400 (± 100)	1,3	2,2	5,7	100
I. ЕІЛ Al $Wp = 6{,}8$ Дж, II. Нанесення консистентної речовини, ЕІЛ Al $Wp = 1{,}3$ Дж	0,6 0,3	До 70	До 100	7550 (± 20)	2650 (± 50)	2,2	5,8	8,1	100

В таблиці 3 зведено результати дослідження за умов, коли продуктивність було зменшено ≅ в чотири рази згідно з першим і другим варіянтами алюмінування криці 20 з використанням на другому етапі консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру (перший варіянт) і алюмінійову пудру та порошок графіту (другий варіянт), за енергії розряду Wp = 2,6, 4,6 і 6,8 Дж на першому етапі леґування.

Зі збільшенням енергії розряду на першому етапі леґування алю-

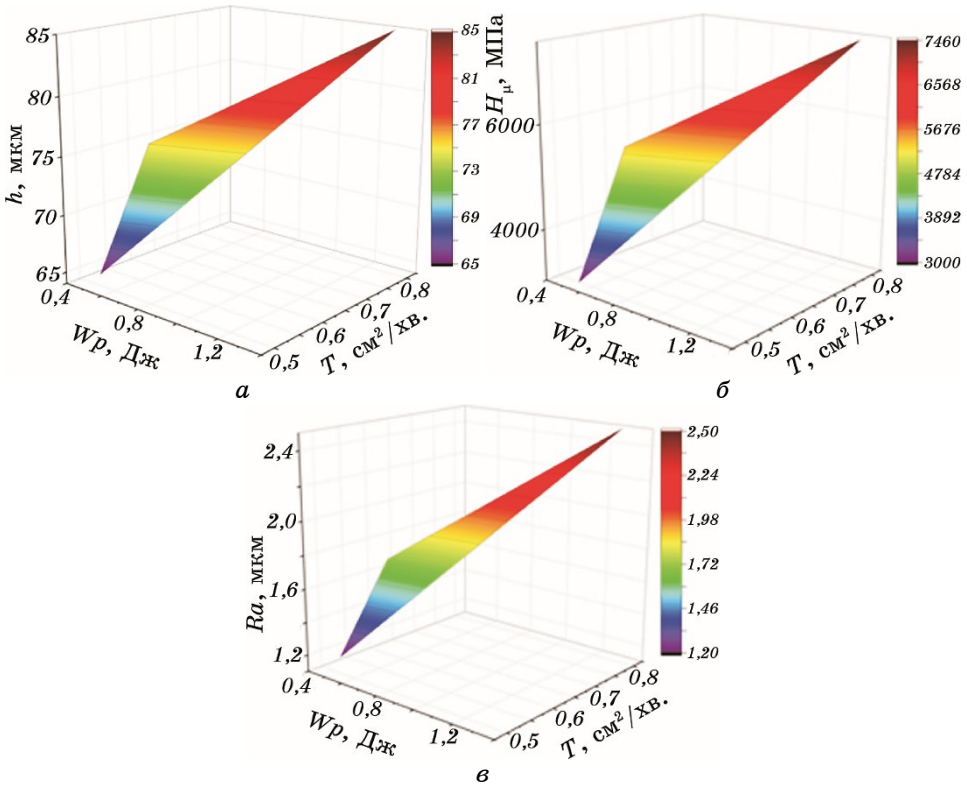


Рис. 2. Зміна параметрів якости: товщини «білого шару» (*а*), мікротвердости (*б*) і шерсткости (*в*) поверхневих шарів криці 20 після ЕІЛ алюмінійовою електродою з використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру (перший варіянт) за умов, коли продуктивність була зменшена ≅ у два рази, в залежності від енергії розряду і продуктивности ЕІЛ на першому етапі.

Fig. 2. Change in quality parameters: the thickness of the ‘white layer’ (*a*), microhardness (*б*) and roughness (*в*) of the surface layers of steel 20 after ESA with an aluminium electrode using a consistent substance that contains aluminium powder (the first option) under conditions where productivity was reduced ≅ twice, depending on the energy of the discharge and the performance of the ESA at the first stage.

мінійовою електродою спостерігається підвищення мікротвердости та товщини «білого» шару і дифузійної зони. Як і в попередньому варіянті леґування за використання консистентної речовини, що містить графіт, відмічається незначне збільшення мікротвердости.

На рисунках 2, 3 представлено залежності параметрів якости поверхневих шарів криці 20 після алюмінування по першому та другому варіянтах з використанням консистентної речовини, яка міс-

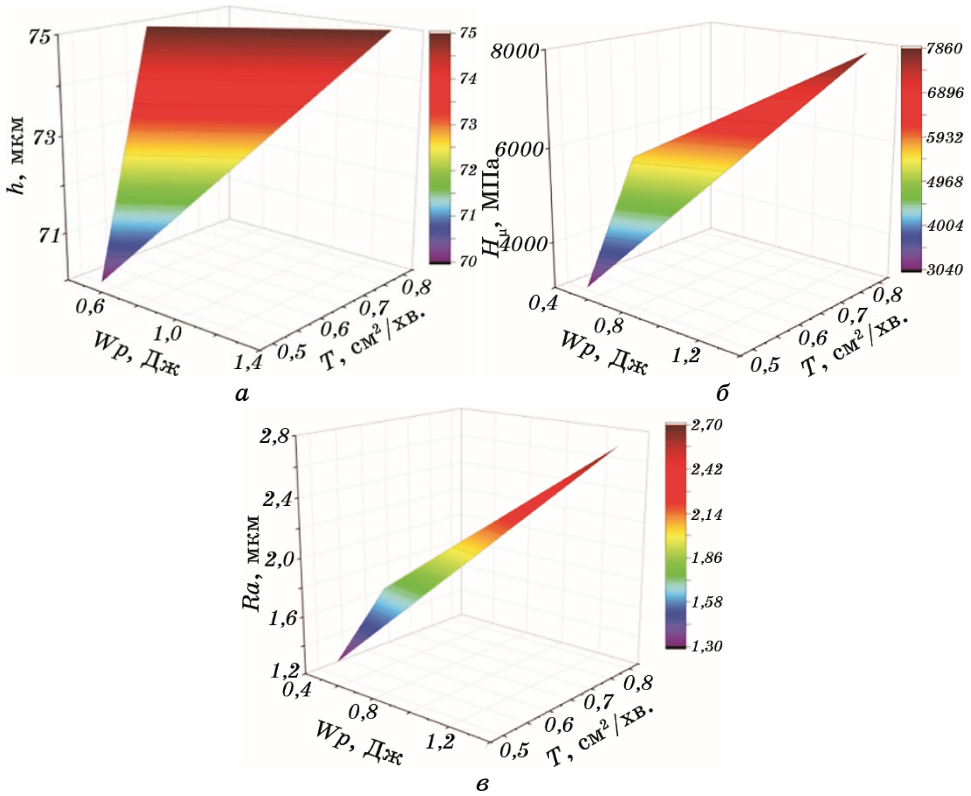


Рис. 3. Зміна параметрів якости: товщини «білого шару» (*а*), мікротвердости (*б*) та шерсткости (*в*) поверхневих шарів криці 20 після ЕІЛ алюмінійовою електродою з використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру та порошок графіту (другий варіянт), за умов, коли продуктивність було зменшено ≅ у два рази, в залежності від енергії розряду та продуктивности ЕІЛ на першому етапі.

Fig. 3. Change in quality parameters: thickness of the ‘white layer’ (*a*), microhardness (*б*) and roughness (*в*) of the surface layers of steel 20 after ESA with an aluminium electrode using a consistent substance containing aluminium powder and graphite powder (second option) according to conditions, when the performance was reduced by ≅ two times, depending on the discharge energy and the performance of the ESA at the first stage.

тить алюмінійову пудру (рис. 2) і алюмінійову пудру та порошок графіту (рис. 3) відповідно до табл. 2 за умов, коли продуктивність було зменшено ≅ у два рази.

Аналіза рисунків 1–3 і таблиць 2 і 3 показала, що після використання другого етапу алюмінування, причому, як після першого варіянту (зменшенні продуктивности в 2 рази), так і після другого (зменшенні продуктивности в 4 рази), зменшується шерсткість поверхневого шару, з використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру та порошок графіту в більшому ступені.

З використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру, незначно збільшується товщина «білого шару» і його мікротвердість, а з додаванням в алюмінійову пудру порошку графіту товщина білого шару майже не змінюється, але мікротвердість, як в «білому шарі», так і в перехідній зоні, збільшується. Суцільність за обох варіянтах другого етапу складає 100%.

3. ВИСНОВКИ

1. В результаті проведених досліджень впливу продуктивности процесу ЕІЛ алюмінійовою електродою-інструментом на параметри якости поверхневих шарів деталів з криці удосконалено технологію алюмінування.
2. За алюмінування у два етапи для обох варіянтів із використанням консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру або алюмінійову пудру та порошок графіту, збільшується мікротвердість «білого шару» та дифузійної зони (в більшому ступені за наявности в консистентній речовині графіту), шерсткість поверхні зменшується, а суцільність покриття складає 100%.
3. До практичної реалізації рекомендується проводити процес алюмінування по першому варіянту: І етап — ЕІЛ алюмінійовою електродою за енергії розряду $Wp = 4{,}6–6{,}8$ Дж, ІІ етап — нанесення консистентної речовини, яка містить алюмінійову пудру та порошок графіту; ЕІЛ виконувати за умов, коли продуктивність буде зменшено ≅ у два рази.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. О. П. Гапонова, В. Б. Тарельник, Т. І. Жиленко, Н. В. Тарельник, О. А. Саржанов, В. І. Мельник, В. М. Власовець, С. В. Павловский, В. О. Охріменко, А. В. Ткаченко, *Металофіз. новітні технол.*, **45**, № 12: 1449 (2023).
2. M. Brochu, J. G. Portillo, J. Milligan, and D. W. Heard, *The Open Surf. Sci. J.*, No. 3: 105 (2011).
3. V. Goncharuk, A. Paramonov, F. Grosu, A. Polikarpov, and A. Kovali, *Mater. Sci. Cond. Matter Phys. Editia*, **8**: 314 (2016).

4. A. I. Komarov, L. Kyzioł, D. V. Orda, D. O. Iskandarova, I. A. Sosnovskiy, A. A. Kurilyonok, and D. Żuk, *Mater.*, **14**: 3555 (2021).
5. S. Sheikh, L. Gan, X. Montero, H. Murakami, and S. Guo, *Intermetallics*, **123**: 106838 (2020).
6. O. Gaponova, C. Kundera, G. Kirik, V. Tarelnyk, V. Martsynkovskyy, Ie. Konoplianchenko, M. Dovzhyk, A. Belous, and O. Vasilenko, *Advances in Thin Films, Nanostructured Materials, and Coatings* (Eds. A. D. Pogrebnjak and V. Novosad) (Springer: 2019), p. 249.
7. G. V. Kirik, O. P. Gaponova, V. B. Tarelnyk, O. M. Myslyvchenko, and B. Antoszewski, *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*, **56**, Nos. 11–12: 688 (2018).
8. В. Б. Тарельник, О. П. Гапонова, О. М. Мисливченко, *Металофіз. новітні технол.*, **41**, № 10: 1377 (2019).
9. V. Martsynkovskyy, V. Tarelnyk, I. Konoplianchenko, O. Gaponova, and M. Dumanchuk, *Advances in Design, Simulation and Manufacturing II* (Eds. V. Ivanov, J. Trojanowska, J. Machado, O. Liaposhchenko, J. Zajac, I. Pavlenko, M. Edl, and D. Perakovic) (Springer: 2020), p. 216.
10. V. Tarelnyk, I. Konoplianchenko, N. Tarelnyk, and A. Kozachenko, *Mater. Sci. Forum*, **968**: 131 (2019).
11. V. B. Tarelnyk, O. P. Gaponova, V. B. Loboda, E. V. Konoplyanchenko, V. S. Martsinkovskii, Yu. I. Semirnenko, N. V. Tarelnyk, M. A. Mikulina, and B. A. Sarzhanov, *Surf. Eng. Applied Electrochem.*, **57**: 173 (2021).
12. В. Б. Тарельник, О. П. Гапонова, Е. В. Коноплянченко, В. С. Марцинковский, Н. В. Тарельник, О. А. Василенко, *Металофіз. новітні технол.*, **41**, № 2: 173 (2019).
13. В. Б. Тарельник, О. П. Гапонова, Е. В. Коноплянченко, В. С. Марцинковский, Н. В. Тарельник, О. А. Василенко, *Металофіз. новітні технол.*, **41**, № 3: 313 (2019).
14. V. B. Tarel'nik, E. V.Konoplyanchenko, P. V. Kosenko, and V. S. Martsinkovskii, *Chem. Petroleum Eng.*, **53**, Nos. 7–8: 540 (2017).

REFERENCES

1. O. P. Haponova, V. B. Tarel'nyk, T. I. Zhylenko, N. V. Tarel'nyk, O. A. Sarzhanov, V. I. Mel'nyk, V. M. Vlasovets', S. V. Pavlovskyy, V. O. Okhrimenko, and A. V. Tkachenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 12: 1449 (2023) (in Ukrainian).
2. M. Brochu, J. G. Portillo, J. Milligan, and D. W. Heard, *The Open Surf. Sci. J.*, No. 3: 105 (2011).
3. V. Goncharuk, A. Paramonov, F. Grosu, A. Polikarpov, and A. Kovali, *Mater. Sci. Cond. Matter Phys. Editia*, **8**: 314 (2016).
4. A. I. Komarov, L. Kyzioł, D. V. Orda, D. O. Iskandarova, I. A. Sosnovskiy, A. A. Kurilyonok, and D. Żuk, *Mater.*, **14**: 3555 (2021).
5. S. Sheikh, L. Gan, X. Montero, H. Murakami, and S. Guo, *Intermetallics*, **123**: 106838 (2020).
6. O. Gaponova, C. Kundera, G. Kirik, V. Tarelnyk, V. Martsynkovskyy, Ie. Konoplianchenko, M. Dovzhyk, A. Belous, and O. Vasilenko, *Advances in Thin Films, Nanostructured Materials, and Coatings* (Eds. A. D. Pogrebnjak

and V. Novosad) (Springer: 2019), p. 249.
7. G. V. Kirik, O. P. Gaponova, V. B. Tarelnyk, O. M. Myslyvchenko, and B. Antoszewski, *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*, **56**, Nos. 11–12: 688 (2018).
8. V. B. Tarel'nik, O. P. Gaponova, and O. M. Mislivchenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 10: 1377 (2019) (in Russian).
9. V. Martsynkovskyy, V. Tarelnyk, I. Konoplianchenko, O. Gaponova, and M. Dumanchuk, *Advances in Design, Simulation and Manufacturing II* (Eds. V. Ivanov, J. Trojanowska, J. Machado, O. Liaposhchenko, J. Zajac, I. Pavlenko, M. Edl, and D. Perakovic) (Springer: 2020), p. 216.
10. V. Tarelnyk, I. Konoplianchenko, N. Tarelnyk, and A. Kozachenko, *Mater. Sci. Forum*, **968**: 131 (2019).
11. V. B. Tarelnyk, O. P. Gaponova, V. B. Loboda, E. V. Konoplyanchenko, V. S. Martsinkovskii, Yu. I. Semirnenko, N. V. Tarelnyk, M. A. Mikulina, and B. A. Sarzhanov, *Surf. Eng. Applied Electrochem.*, **57**: 173 (2021).
12. V. B. Tarel'nik, O. P. Gaponova, E. V. Konoplyanchenko, V. S. Martsinkovskiy, N. V. Tarel'nik, and O. A. Vasilenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 2: 173 (2019) (in Russian).
13. V. B. Tarel'nik, O. P. Gaponova, E. V. Konoplyanchenko, V. S. Martsinkovskiy, N. V. Tarel'nik, and O. A. Vasilenko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 3: 313 (2019) (in Russian).
14. V. B. Tarel'nik, E. V.Konoplyanchenko, P. V. Kosenko, and V. S. Martsinkovskii, *Chem. Petroleum Eng.*, **53**, Nos. 7–8: 540 (2017).

Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2024, vol. 46, No. 4, pp. 325–341
https://doi.org/10.15407/mfint.46.04.0325
Reprints available directly from the publisher

© 2024 G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Published by license under
the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics–
N.A.S. of Ukraine Publishers imprint.
Printed in Ukraine.

PACS numbers: 61.05.cp, 61.25.Mv, 61.66.Dk, 62.20.Qp, 64.75.Op, 81.30.Fb, 81.40.Ef

Вплив надлишкового тиску в процесі кристалізації на структуру та властивості стопу системи Al–Si–Cu для авіяційної техніки

М. М. Петришин[*], А. Ю. Сезоненко[**], М. М. Ямшинський[*,**], Є. Г. Биба[*], І. В. Лук'яненко[*,**], Д. С. Леонов[**], А. А. Колесніченко[**], Р. В. Литвин[**,***], М. Ю. Барабаш[*,**,****]

[*]*Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського», просп. Берестейський, 37, 03056 Київ, Україна*
[**]*Технічний центр НАН України, вул. Покровська, 13, 04070 Київ, Україна*
[***]*Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, вул. Омеляна Пріцака, 3, 03142 Київ, Україна*
[****]*Інститут газу НАН України, вул. Дегтярівська, 39, 03113 Київ, Україна*

Corresponding authors: Maksym Yuriyovych Barabash
E-mail: mbarabash@nasu.kiev.ua

[*]*National Technical University of Ukraine 'Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute', 37, Beresteiskyi Ave., UA-03056 Kyiv, Ukraine*
[**]*Technical Centre, N.A.S. of Ukraine, 13, Pokrovs'ka Str., UA-04070 Kyiv, Ukraine*
[***]*I.M. Frantsevych Institute for Problems in Materials Science, N.A.S. of Ukraine, 3, Omeljan Pritsak Str., UA-03142 Kyiv, Ukraine*
[****]*The Gas Institute, N.A.S. of Ukraine, 39, Degtyarivska Str., UA-03113 Kyiv, Ukraine*

Citation: M. M. Petryshyn, A. Yu. Sezonenko, M. M. Yamshinskij, Ie. G. Byba, I. V. Lukianenko, D. S. Leonov, A. A. Kolesnichenko, R. V. Lytvyn, and M. Yu. Barabash, Injection of Excess Pressure during the Crystallization Process on the Structure and Power of the Alloy of the Al–Si–Cu System for Aviation Technology, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **46**, No. 4: 325–341 (2024). DOI: 10.15407/mfint.46.04.0325

У роботі досліджено мікролеґований високоміцний авіяційний стоп системи Al–Si–Cu, одержаний з використанням додаткового тиску на розтоп під час кристалізації. Розвинуто технологію та конструктивні особливості ламінарного заповнення форми розтопом з метою мінімізації формування технологічних дефектів лиття. Досліджено особливості структури й умови кристалізації ливарного стопу АК9М2. Визначено рівень фізико-механічних властивостей стопу та механізм його руйнування. Проаналізовано та визначено механізми перенесення тепла, що свідчать про перспективність використання стопу як матеріялу для вирішення задач теплообміну.

Ключові слова: алюмінійові ливарні стопи, термічне напорошення, острівцеві плівки, розмірні ефекти, механічні властивості, тверднення, дифрактометрія, електронна мікроскопія, оптична спектроскопія.

The microalloyed high-strength aviation alloy of the Al–Si–Cu system obtained using additional pressure on the melt during crystallization is studied in the work. The technology and design features of laminar filling of the mould are developed in order to minimize the formation of technological casting defects. The peculiarities of the structure and crystallization conditions of the АК9М2 alloy are studied. The level of physical-mechanical properties of obtained alloy and its fracture behaviour are determined. Mechanisms of heat transfer are analysed and determined, which allow the promising use of obtained alloys as a material for heat-exchange applications.

Key words: aluminium foundry alloys, thermal sputtering, island films, size effects, mechanical properties, hardening, diffractometry, electron microscopy, optical spectroscopy.

(Отримано 5 березня 2024 р.; остаточн. варіянт — 15 березня 2024 р.)

1. ВСТУП

Сучасна техніка висуває високі вимоги до комплексу властивостей матеріялів під час виробництва їх та експлуатації. Актуальним завданням фізичного матеріялознавства є подальше вдосконалення вже наявних і розробка нових алюмінійових стопів для різних галузей машинобудування. Слід зазначити, що до високоміцних відносять алюмінійові стопи, які мають границю міцности за розтягування більше 300 МПа [1]. Важливим напрямом є розробка алюмінійових стопів, які деформуються, системи Al–Si–Cu. Деформовані термічно зміцнювані алюмінійові стопи системи Al–Si–Cu знаходять широке застосування в авіяційному та космічному будуванні. Інтерес до таких стопів викликано вдалим поєднанням їхніх характеристик: низькою вартістю порівняно з іншими системами термічно зміцнюваних алюмінійових стопів, відносно високою технологічною пластичністю, корозійною стійкістю, зварюваністю, а також невеликою густиною. Крім того, зміна хемічного складу та режимів термічного оброблення дають змогу широко варіювати спів-

відношення між характеристиками міцности та пластичности цих стопів [1–7]. Відомо, що процеси модифікування не змінюють хемічний склад стопу, а сприяють зміні величини та форми структурних складових [8, 9].

Істотним недоліком більшости стопів алюмінію є низькі ливарні властивості, що заважає одержувати вироби складної форми методом лиття. Високі ливарні властивості мають стопи на основі системи Al–Si–Cu [10]; однак навіть у найбільш високоміцного стопу цієї групи АК8М3ч (ВАЛ8) межа міцности $\sigma_в \leq 350$ МПа, що не відповідає сучасним вимогам. Тому актуальними є дослідження, які стосуються розроблення нових багатокомпонентних ливарних стопів алюмінію із вдалим поєднанням механічних і ливарних властивостей. Такі стопи мають задовольняти низці критеріїв: мати достатню кількість евтектики сприятливої морфології, яка формується безпосередньо після кристалізації чи термічного оброблення, мінімальний ефективний інтервал кристалізації для досягнення достатньо високого рівня ливарних властивостей, а Al-матриця має бути леґована таким чином, щоб забезпечити необхідний рівень механічних властивостей [10]. Слід зауважити, що присутність більше 30% евтектичної складової в структурі стопів має вирішальне значення для забезпечення високих технологічних властивостей. Тому, як базові для наступного леґування, необхідно обирати стопи з оптимальним співвідношенням міцність/пластичність і достатнім вмістом евтектики [11]. Недостатній рівень ливарних властивостей стопу може бути компенсований шляхом оптимізації технологічного процесу лиття, зокрема прикладанням тиску на розтоп.

Метою роботи було дослідження фазового складу, мікроструктури та фізико-механічних властивостей мікролеґованого стопу на основі Al–Si–Cu, одержаного за умов прикладання надлишкового тиску в процесі кристалізації.

2. МАТЕРІЯЛИ ТА МЕТОДИ ЕКСПЕРИМЕНТУ

Оптимальний вибір технологічних параметрів топлення та підготовки розтопу до лиття має вирішальний вплив на кількість технологічних дефектів у виливку та на структуру й механічні властивості одержаного виливка. Якщо виливок має авіяційне призначення, він має відповідати найвищим галузевим стандартам щодо відсутности технологічних дефектів лиття та рівня механічних властивостей. Для виготовлення виливка було обрано алюмінійовий стоп АК9М2 ($AlSi_9Cu_2$), який поєднує високі механічні характеристики та прийнятні ливарні властивости. Для приготування стопу використовували наступні вихідні шихтові матеріяли:

– чистий алюміній марки А7;
– ліґатуру AlSi (25% Si);

– чисту мідь марки М1;
– ліґатуру AlTiB.

Використання високоякісних шихтових матеріялів уможливлює одержати стоп з низьким вмістом шкідливих домішок, передусім Феруму. Топлення шихтових матеріялів проводили у керамічному тиґлі марки BU 50 Stabil (Noltina/Morgam, Germany) місткістю у 50 кг за алюмінієм. У роботі було використано піч електроопору, що дало змогу точно підтримувати задану температуру на всіх етапах топлення та технологічного оброблення розтопу перед литтям. Це уможливило одержати мінімальне газонасичення розтопу.

Дослідження атомарно-кристалічної структури Al–Si–Cu-стопів здійснено методою рентґенівської дифрактометрії [12] на рентґенівському дифрактометрі Ultima-IV виробництва Rigaku (Японія) в Національному технічному університеті України «КПІ імені Ігоря Сікорського». Зйомку полікристалічного матеріялу проводили в паралельному пучку монохроматичного (характеристичного) випромінення з мідної аноди (довжина хвилі для CuK_α = 1,54051 Å). Дифраґоване випромінення реєструвалося на ПК. Ідентифікацію піків на дифрактограмах проводили за допомогою програмного комплексу ICDD PDF-2 та PDF-4.

Фізико-механічні властивості стопів на розтяг здійснювали на універсальній машині УТМ-100 з автоматичним записом діяграми навантаження за швидкости розтягу у 10^{-3} мм·с$^{-1}$, використовуючи циліндричні зразки, діяметер робочої частини яких складав 3 мм, а робоча довжина — 38 мм. Механічні випробування зразків леґованих стопів проводили за кімнатної температури. За результатами випробувань визначали границі плинности σ_{02} та міцности $\sigma_в$, рівномірне подовження $\delta_{рівн}$ і відносне звуження ψ.

Дослідження структури та характер руйнування стопів проводили методами мікроскопій: світлової (AM-Scope FMA050) та сканувальної (CEM JSM-6490LV, JEOL (Японія), оснащений приставкою для енергодисперсійної мікроаналізи). Для оброблення даних і кількісної мікроаналізи використовували програмне забезпечення INCA Energy за схемою корекції матричних ефектів XPP. Такий підхід на основі методи PhiRho-Z забезпечує високу точність обрахунку та точну аналізу елементів у матриці зразка.

Вимірювання на твердість за Роквеллом (*HRC*) алюмінійового стопу проводили за стандартною методикою (ДСТУ ISO 6508-1:2013) з подальшим перерахунком за Брінеллевою шкалою (*HB*). Навантаження — 980 Н, індентор — крицева загартована кулька діяметром у 1,58 мм, тривалість витримки складала 10–15 с.

Для визначення теплофізичних параметрів Al–Si–Cu-стопу був використаний неруйнівний безконтактний імпульсний метод вимірювання температуропровідности (IMBT), розроблений у Технічному центрі НАН України [13]. В IMBT передня поверхня зразка

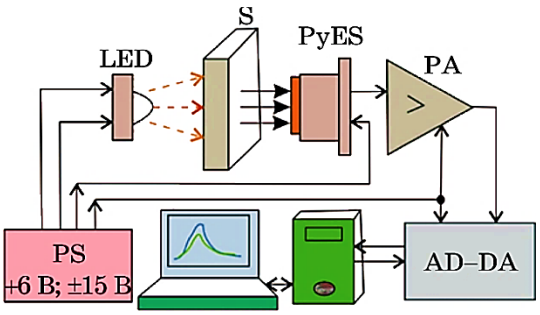


Рис. 1. Блок-схема вимірювального стенду [13]: LED-світлодіода GREE-XML, S — зразок, PyEs — піродавач IRA-E700ST0, PA — посилювач, AD–DA — блок АЦП–ЦАП, PS — блок живлення.

Fig. 1. Block diagram of the measuring stand [13]: GREE-XML LED, S—sample, PyEs—pyrosensor IRA-E700ST0, PA—amplifier, AD–DA—ADC–DAC block, PS is a power supply unit.

опромінюється імпульсом світла видимого діяпазону тривалістю у 100 мс («первинний» потік випромінення). Оптично поглинута частина цього «первинного» потоку перетворюється на теплову енергію, яка викликає підвищення температури, що дає початок поширенню температурних хвиль у зразку. Певна частина теплового потоку, не розсіюючись, викликає підвищення температури на протилежній поверхні зразка, де перетворюється на «вторинний» потік інфрачервоного (ІЧ) випромінення. Цей «вторинний» потік ІЧ-випромінення, який затримується відносно падного «первинного» через скінченну швидкість процесу дифузії тепла, контролюється ІЧ-детектором [13] (рис. 1).

2.1. Особливості технології топлення та підготовки розтопу до лиття

Основні етапи технологічного оброблення розтопу перед литтям складалися з рафінування, дегазації розтопу та введення ліґатури. Рафінування розтопу здійснювали за допомогою введення в розтоп спеціяльного покривально-рафінувального ґранульованого флюсу на основі хлоридів, карбонатів і фторидів. Було використано флюс марки Elimoxal NF80/GF (Aluminium Martigny France, Франція) в загальній кількості у 0,2% від маси шихтових матеріялів. Флюс вводили двома етапами для максимальної ефективности рафінування розтопу. На першому етапі флюс вводили разом із шихтовими матеріялами на дзеркало розтопу. На другому етапі після розтоплення всіх шихтових матеріялів флюс вводили під дзеркало розтопу за допомогою спеціяльного інструменту — занурюваного «дзвіночка». Тривалість рафінування складала 2–3 хвилини.

Дегазацію розтопу для зменшення вмісту розчиненого в алюмінійовому розтопі водню проводили введенням спеціяльного таблетованого флюсу марки Desydral N71P (Aluminium Martigny France, Франція) в кількості у 0,1% від маси розтопу. Таблетований флюс вводили в розтоп за допомогою занурюваного «дзвіночка». За хемічною реакцією виділявся чистий азот і відбувався процес барботації розтопу. Тривалість дегазації складала 3 хвилини.

Введення ліґатури проводили з метою подрібнення зерен матеріялу виливка для гомогенізації структури та підвищення механічних характеристик. У теперішній час одним із найбільш ефективних способів зменшення розміру зерен є введення в розтоп ліґатури AlTiB (5% Ti, 1% B, решта — Алюміній). Використовували ліґатуру AlTiB (KBM Master Alloys B.V., Нідерланди) у формі стрижнів діяметром у 9,5 мм у кількості 0,1% від маси розтопу. Формування додаткових центрів кристалізації в розтопі відбувалося вже на другу хвилину після введення ліґатури.

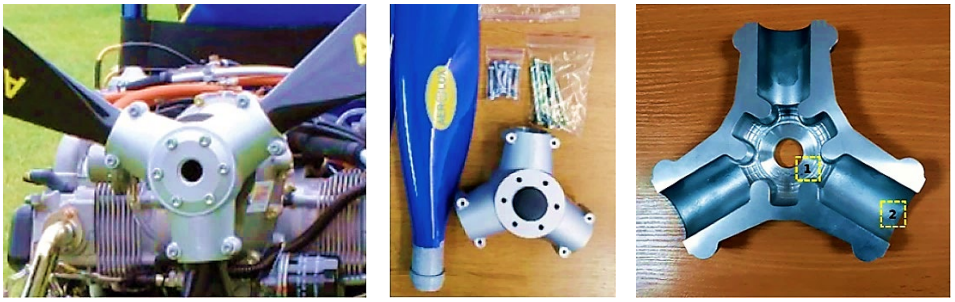
Після проведення всіх вищезазначених технологічних операцій і видалення шлаку з поверхні розтопу відбувався процес лиття. Для цього використовували металеву форму (кокіль) Vernifond (Fondermat, Італія), покриту антипригарним покриттям.

Під час проєктування форми та відпрацювання технології лиття було вирішено дві основні задачі:

– створити умови для ламінарного заповнення форми розтопом;
– створити тиск на розтоп в процесі твердіння.

Технологічними та конструкційними засобами було реалізовано ламінарне заповнення форми розтопом, щоб запобігти формуванню технологічних дефектів лиття (рис. 2). Для реалізації ламінарного заповнення форми розтопом використовували кокільну нахильну машину. Технологія нахилу форми (кокілю) на кут у 45–90 ґрадусів перед заливанням і потім повертання форми у вихідну позицію із заданою сталою швидкости уможливлює домогтися ламінарного заповнення форми розтопом. Вибрана технологія лиття поряд з литвом під низьким тиском дає змогу одержати виливки з мінімальними технологічними дефектами та високою газощільністю одержаних виливків [14]. Тиск на розтоп складав 6,726 Па (≅ 0,07 атм.), що підтримували постійним упродовж всього часу твердіння виливка. Вектор прикладання тиску збігався з центральною віссю симетрії виливка. Технологічні умови були подібні до лиття за допомогою машин ЛПНТ (лиття під низьким тиском). У результаті застосування вищезазначеної технології лиття (розробленої SA-Foundry sp.z.o.o., Польща й Aerolux, Україна) було одержано виливок з високими експлуатаційними характеристиками та мінімальною кількістю технологічних дефектів, незважаючи на істотну товщину виливка.

Після одержання виливка з двох його різних частин було вирізано серії зразків для визначення їхніх особливостей структури та фі-



а *б* *в*

Рис. 2. Конструкційний вигляд деталю «ступиця», що одержаний за ламінарним заповненням форми розтопом: одержаний з виливка в комплекті для застосування в легкомоторних літаках (*а*), для безпілотного літального апарату (БпЛА) (*б*), після термічного та механічного оброблень (*в*); 1, 2 — зони, з яких вирізали зразки серії 1 і 2.

Fig. 2. Constructional view of the 'hub' detail obtained by laminar filling of the mould with melt: obtained from a casting in a set for use in light-motor aircraft (*а*), for pilotless airborne vehicle (PAV) (*б*), after thermal and mechanical processings (*в*); 1, 2—zones, from which samples of series 1 and 2 are cut.

зико-механічних властивостей. Зразки серії 1 було вирізано максимально близько до вектора прикладання додаткового тиску на розтоп; зразки серії 2 було вирізано на максимально можливій віддалі від вектора прикладання тиску (рис. 2, *в*). Таким чином, було обрано серії зразків, що характеризують структурні особливості та механічні властивості різновіддалених від вектора прикладання тиску частин виливка.

Хемічну аналізу стопів проводили за допомогою рентґенофлюоресцентної аналізи на приладі Expert 3L, чим було підтверджено, що стопи належать до марки АК9М2 (табл. 1).

3. РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ОБГОВОРЕННЯ ЇХ

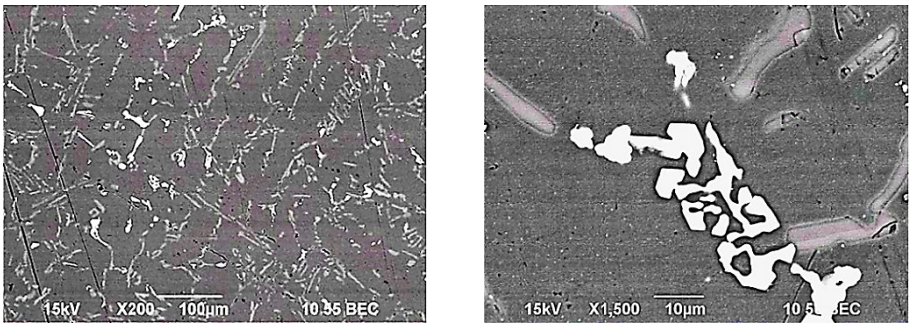
У литих стопах доевтектичного типу, крім евтектики (Al + Si), при-

ТАБЛИЦЯ 1. Хемічний склад зразків (мас.%).

TABLE 1. Chemical composition of samples (wt.%).

Стоп	Al, %	Si, %	Cu, %	Mg, %	Fe, %	Ti, %	Zn, %
Серія 1	основа	11,395	1,317	0,967	0,193	0,191	0,274
Серія 2	основа	11,611	1,481	0,838	0,231	0,096	0,242

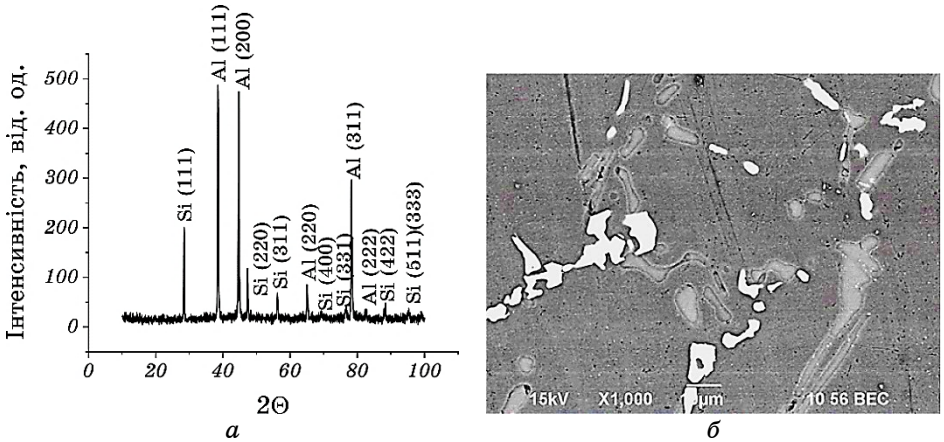
сутні первинні дендрити α-твердого розчину на основі алюмінію (α-Al) (рис. 3, *а*, *б*). З підвищенням концентрації Силіцію спостерігається збільшення частки евтектики. У структурі заевтектичного силуміну з'являються кристали первинного кремнію (Si) й евтектика (Al + Si).



а *б*

Рис. 3. РЕМ-зображення мікроструктури доевтектичного стопу Al–S–Cu за збільшення у ×200 (а) та ×1500 (б).

Fig. 3. SEM image of the microstructure of the pre-eutectic Al–S–Cu alloy at a magnification of ×200 (*a*) and ×1500 (*б*).



а *б*

Рис. 4. Дифрактограма 2 модифікованого Al–Si–Cu-стопу, одержаного методою неперервного лиття під тиском (*а*); мікроструктура стопу після гомогенізації (*б*).

Fig. 4. Diffraction pattern of the modified Al–Si–Cu alloy obtained by the method of continuous casting under pressure (*a*); microstructure of the alloy after homogenization (*б*).

За результатами рентґенофазової аналізи виявлено наявність піків, які відповідають алюмінію та силіцію для модифікованого стопу, одержаного методом неперервного лиття під тиском (рис. 4, *а*). Інші фази не ідентифіковано, що випливає із аналізи мікроструктури стопів після гомогенізації за $T = 515°C$ упродовж 5–7 годин. У процесі гомогенізації відбувається фраґментація та сфероїдизація фаз; в структурі виявляються голкоподібні включення довжиною у 10–15 мкм (рис. 4, *б*).

На рисунку 5 показано мікроструктуру стопу АК9М2, яка складається в основному з дендритної морфології α-Al, збагаченої частинками Si, та евтектики Al + Si. За допомогою EDS-аналізи також виявлено наявність Cu, що може приводити до утворення фаз Al–Cu. За цими даними (табл. 2) відмічено присутність Al- та Si-складових, яких показано на рис. 5, *а*, *б*. У структурі також можлива наявність фази Al_2Cu — розчиненого нерівноважного надлишку, який, ймовірно, поряд із фазою AlCu приводить до збільшення концентрації Купруму у алюмінійовому твердому розчині від 1,8%

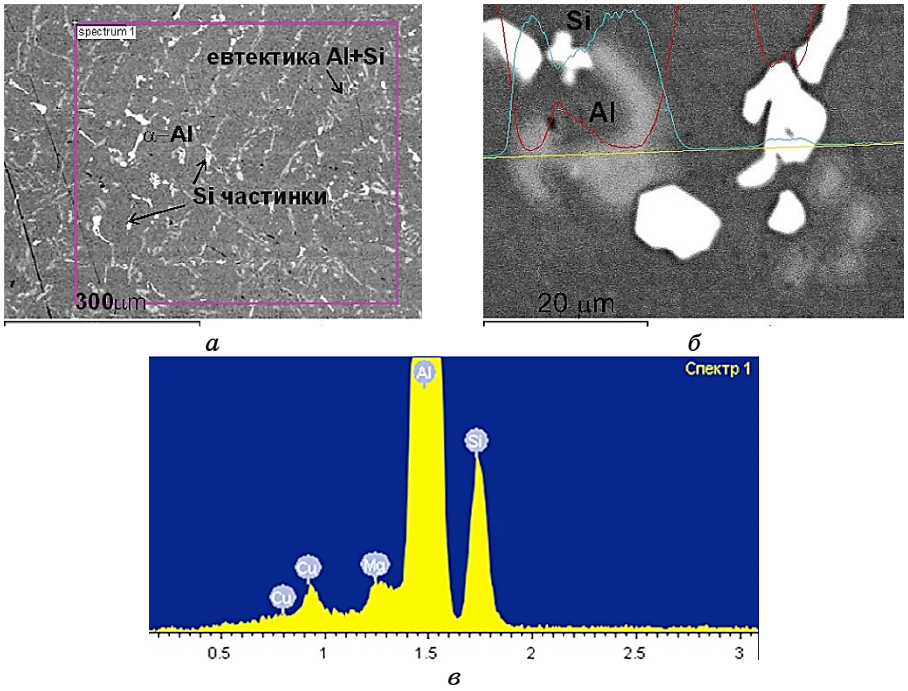


Рис. 5. РЕМ-зображення мікроструктури стопу АК9М2: морфологія доевтектичного стопу (*а*), EDS-профіль (*б*), EDS-спектер елементної аналізи (*в*).

Fig. 5. SEM image of the microstructure of the AK9M2 alloy: morphology of the pre-eutectic alloy (*a*), EDS profile (*б*), EDS spectrum of elemental analysis (*в*).

ТАБЛИЦЯ 2. EDS-мікроаналіза Al–Si–Cu-стопу в литому стані.

TABLE 2. EDS microanalysis of the as-cast Al–Si–Cu alloy.

Фаза			
Al	Si	Cu	
3,02	96,98	—	Si + α-Al
83,57	14,38	2,05	α-Al + Si
56,07	9,79	28,32	α-Al + Al_2Cu + Si

у литому стані до 2,2% після відпалу. Водночас розмір фаз під час кристалізації може збільшуватися. Визначено, що після прикладання тиску голчата евтектична фаза α + Si рівномірно розподіляється у матриці.

Для порівняльної аналізи властивостей стопів серії 1 і 2 були проведені стандартні випробування механічних характеристик (табл. 3). Вигляд кривих навантаження наведено на рис. 6, *а*.

Дослідження механічних властивостей стопів показали, що достатньо високий рівень міцнісних характеристик ($\sigma_{0,2}$ = до 350 МПа, $\sigma_в$ = до 400 МПа) уможливлює віднести одержані стопи на основі потрійної системи Al–Si–Cu до високоміцних [1, 5, 15]. Водночас пластичність стопів є порівняно низькою (0,8–1,42%).

В області кімнатних температур, де основним механізмом деформації є дислокаційне ковзання, значення границь плинности для обох серій стопу близькі. Однак, водночас, швидкість деформаційного зміцнення стопу серії 2 вище, ніж у стопу серії 1 (рис. 6, *в*). Це свідчить про те, що за деформаційного зміцнення стопів взаємодія дислокацій з субструктурою відбувається за різними механізмами. У випадку твердого розчину з дисперсійним зміцненням це — механізм взаємодії рухливих дислокацій з пружніми полями навколо частинок, роль яких не змінюється зі збільшенням ступеня деформації. Зі збільшенням долі евтектики, густина дислокацій у процесі деформування зростає швидше завдяки дії джерел Франка–Ріда на міжфазних межах евтектичних колоній за малої довжини вільного пробігу дислокацій. Рівномірна деформація $\varepsilon_р$ для дисперснозміц-

ТАБЛИЦЯ 3. Механічні властивости стопів 1 та 2.

TABLE 3. Mechanical properties of alloys 1 and 2.

Температура, °C	$\sigma_в$, МПа		$\sigma_{0,2}$, МПа		$\varepsilon_р$, %		ψ, %	
	1	2	1	2	1	2	1	2
24	357	395	325	344	0,80	1,42	0,670	0,675

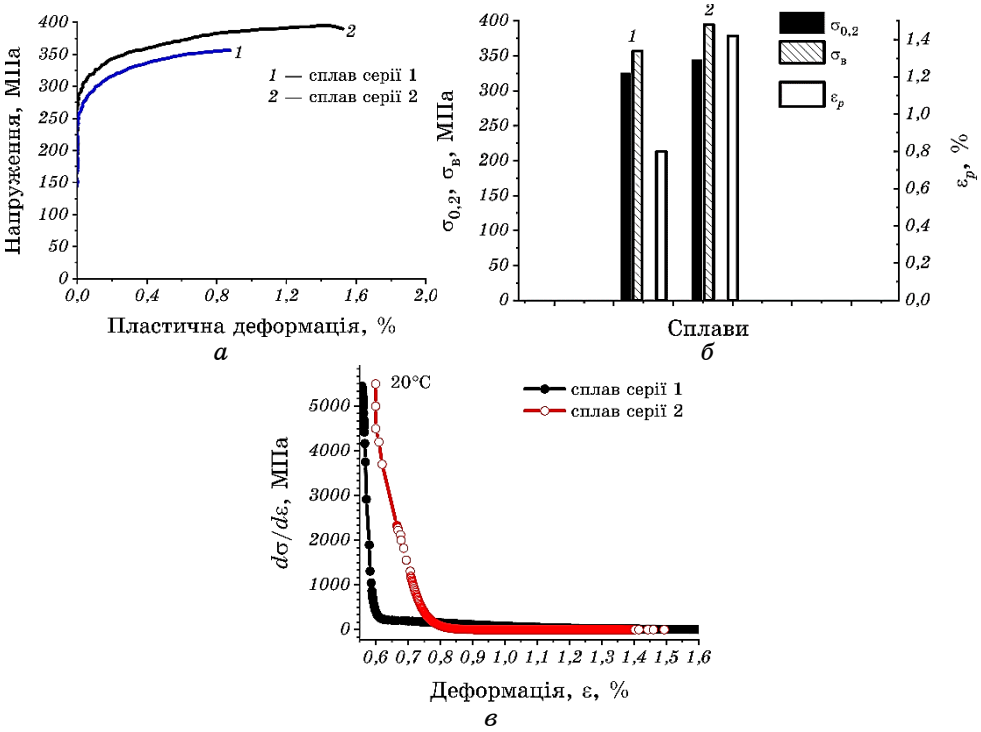


Рис. 6. Фізико-механічні властивости стопів серії 1 і 2: експериментальні криві навантаження напруження–деформація (*а*), гістограми механічних властивостей стопів серії 1 і 2 (*б*), швидкість деформаційного зміцнення (*в*).

Fig. 6. Physical-mechanical properties of alloys of series 1 and 2: experimental stress–strain load curves (*a*), histograms of mechanical properties of alloys of series 1 and 2 (*б*), the rate of strain hardening (*в*).

неного твердого розчину визначається модифікованим співвідношенням за Консидером [16]: $\sigma = (1+m)^{-1} d\sigma / d\varepsilon$, де m — показник швидкісної чутливости деформованого напруження, який за низьких температур нехтовно малий. За кімнатної температури величина ε_p для стопу серії 2 складає 1,42%. Зразок руйнується без утворення шийки з причини сильного деформаційного зміцнення; деформація в момент руйнування складає 0,8%. Як наслідок, максимальне напруження в стопі серії 1 виявляється вищим, аніж у стопі серії 2. Таким чином, деформація різновіддалених від вектора прикладання тиску частин виливка відрізняється майже вдвічі.

Фрактографічні дослідження серії зразків 1 і 2 будувалися на порівняльній аналізі зламів зразків стопів після випробувань на розтяг за кімнатної температури (ДСТУ7305:2013). Фрактографічну аналізу проводили за допомогою електронної мікроскопії на прила-

ді JSM-6490LV. З точки зору ступеня розвитку рельєфу поверхні руйнування злами можна кваліфікувати за різними типами. Показаний на рис. 7, *а* злам характеризується тим, що, крім кільцевої зони зрізу, основну площину руйнування орієнтовано перпендикулярно осі навантаження. В межах такого типу зламу ступінь розвитку рельєфу може змінюватись у широких границях; однією з його характеристик є висота мікронерівностей рельєфу.

Інший тип руйнування, наведений на рис. 7, *б*, характеризується тим, що основну площину руйнування перетинають орієнтовані перпендикулярно площині надрізу зразка вирви металу, яких обмежено, принаймні з одного боку, гладкою поверхнею розшарування. Злам розташовується по двох або декількох площинах руйнування, орієнтованих перпендикулярно осі зразків і з'єднаних «сходами».

Вивчення особливостей мікрорельєфу кожної зони серії стопів 1 і 2 показало, що є глибокі осередкові (вторинні) тріщини витягнутої

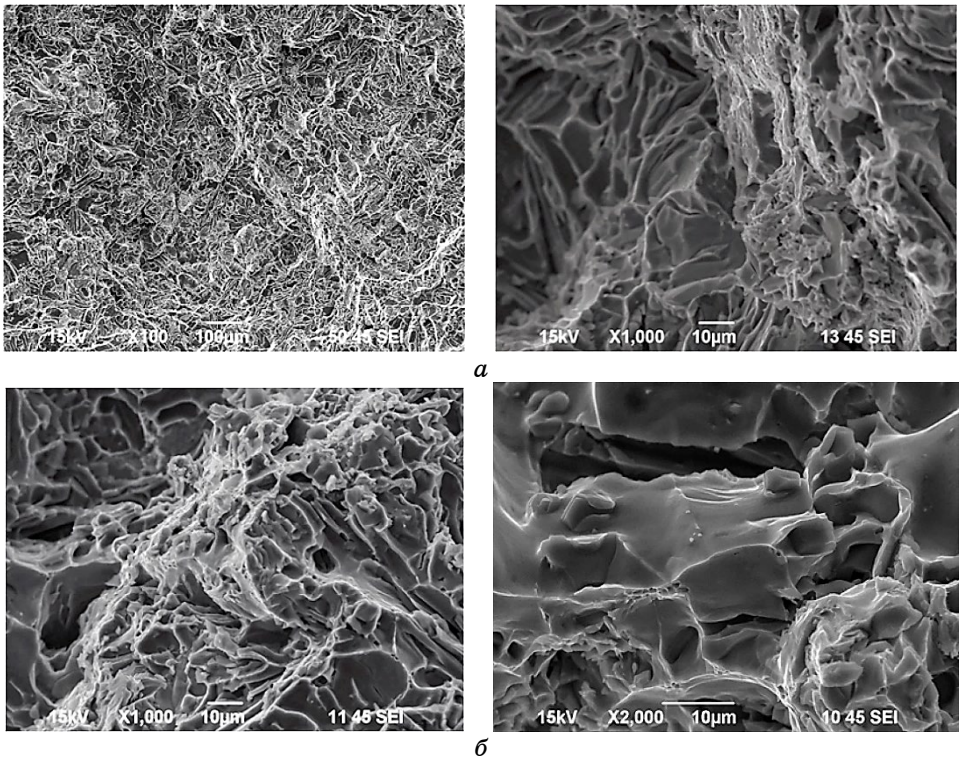


Рис. 7. Мікрофотографії поверхні руйнування зразків за кімнатної температури: стопи серії 1 (*а*), стопи серії 2 (*б*).

Fig. 7. Photomicrographs of the fracture surface of samples at room temperature: alloys of series 1 (*а*), alloys of series 2 (*б*).

ТАБЛИЦЯ 4. Твердість за Брінеллем стопів серії 1 та 2.

TABLE 4. Brinell hardness of alloys of series 1 and 2.

Твердість за Брінеллем, *HB*			
Діяметер відбитка, мкм	Стоп серії 1	Діяметер відбитка, мкм	Стоп серії 2
908	124	901	131
896	134	903	140
914	143	929	137

чи неправильної форми, розташовані перпендикулярно до поверхні зламу, крупні округлі ямки, які відображають руйнування вихідних зерен, ланцюги дрібних ямок, що розташовані на світлих гребнях. Спостерігаються також відносно великі ямки розгалуженої форми, розміром у 10 мкм з елементами в'язко-ямкового руйнування. Також у радіяльній зоні є елементи в'язкого зламу, для якого характерна наявність ділянок з розвиненим мікрорельєфом (ямками та гребнями), які виникли через злиття мікропор і порожнеч. Виразно видно такі елементи рельєфу, як гребені відриву та струмковий візерунок. Мікрорельєф наведених зон складається з рівновісних ямок розміром у 5–10 мкм, які знаходяться в контакті та формують порівняно однорідну поверхню руйнування. В таких стопах основним видом руйнування є характерне змішане з переважною долею транскристалітного.

Результати вимірювання на твердість зразків серії 1 і 2 за статичного навантаження наведено в табл. 4.

Визначено, що значення твердости для стопів серії 1 і 2 — одного порядку. Високі значення міцности та твердости стопів Al–Si–Cu можна пояснити особливостями механізму деформації. В процесі навантаження стопів цієї системи відбувається релаксація напружень у деформованому шарі з можливістю підвищення пластичности за розтягу. Швидкість деформування за статичного навантаження може слугувати додатковою діягностичною ознакою для оцінки якости одержаних матеріялів.

У роботі визначено коефіцієнт температуропровідности ливарного алюмінійового стопу, одержаного за прикладання надлишкового тиску в процесі кристалізації (табл. 5).

На рисунку 8 наведено розподіл інтенсивности теплового імпульсу у часі під час проходження тепла через повітря та зразок. У процесі міряння температуропровідности у зразку в початковий момент проходження світлового імпульсу світла спостерігається істотно неоднорідний розподіл його швидкостей. Це відповідає максимуму в центрі комірки, що перевищує значення швидкости розповсюдження імпульсу світла на межах комірки у декілька разів. З

ТАБЛИЦЯ 5. Результати мірянь коефіцієнта температуропровідности стопу АК9М2.

TABLE 5. Results of measurements of the coefficient of thermal conductivity of the АК9М2 alloy.

Ливарний стоп марки АК9М2	Зсув у часі теплового імпульсу через повітря, $\tau_п$, 10^{-3} с	Зсув у часі теплового імпульсу через зразок $\tau_з$, 10^{-3} с	Товщина зразка $L \cdot 10^{-6}$, м	Коефіцієнт температуропровідности $\chi \cdot 10^{-6}$, м^2/с
	116	134	1250	86

плином часу криві розподілу вирівнюються, і швидкість прямує до сталого значення по всій комірці. У металах і стопах можливі два основних механізми перенесення тепла: пружні коливання ґратниці (фононний механізм) і перенесення вільними електронами. Також важливим є врахування наявности величини поруватости, форми, розмірів і параметрів пор, що істотно впливають на значення температуропровідности. Тому слід проявляти крайню обережність в аналізі одержаних результатів.

Встановлено також, що на поверхні тіла (зразка) достатньо швидко досягається стаціонарній стан. Істотних відмінностей у температуропровідності зразків серій 1 і 2 не виявлено, що можна пояснити їхніми однаковими складами. Порівняння виміряної темпе-

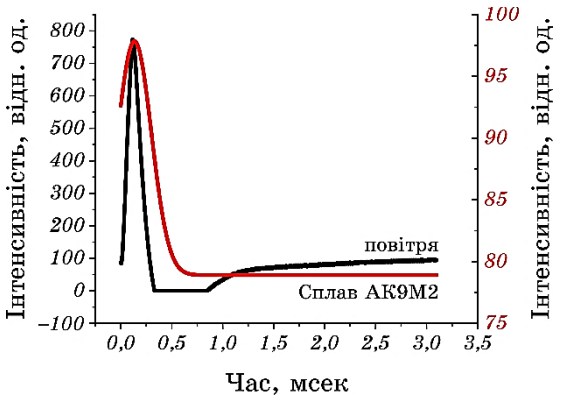


Рис. 8. Інтенсивність теплових потоків у зразку Al–Si–Cu і повітрі.

Fig. 8. Intensity of heat flows in the Al–Si–Cu sample and air.

ратуропровідности зразків з довідковими значеннями свідчить про високий рівень цієї характеристики для одержаного матеріялу та можливість використання його в конструкціях з інтенсивним теплообміном.

4. ВИСНОВКИ

Технологічними та конструкційними засобами реалізовано ламінарне заповнення форми розтопом з метою мінімізації формування технологічних дефектів лиття. За цією технологією одержано виливок зі стопу системи Al–Si–Cu з високими експлуатаційними параметрами та мінімальною кількістю технологічних дефектів, незважаючи на істотну товщину виливка.

Визначено фазовий склад і мікроструктуру зразків з серії 1 і 2, які відрізняються умовами прикладення тиску під час лиття. Встановлено високий рівень механічних властивостей створених стопів, що поєднується з високими ливарними характеристиками. Визначено, що мікролеґований високоміцний авіяційний стоп системи Al–Si–Cu, одержаний з використанням додаткового тиску на розтоп за кристалізації, характеризується більш високою низькотемпературною пластичністю. Так, деформація до руйнування під час випробувань на розтяг стопу серії 2 складає 1,42%, а для стопу серії 1 — 0,8%. Це зумовлено механізмом руйнування, а саме, зростанням долі транскристалітного руйнування завдяки пластинчастій двофазній структурі, що підтверджується фактографічними дослідженнями. Зі збільшенням вмісту евтектики у стопі характерним є змішаний спосіб руйнування з преважною долею транскристалітного.

Визначено коефіцієнт температуропровідности ливарного алюмінійового стопу, одержаного за прикладання надлишкового тиску в процесі кристалізації. Запропоновано механізми перенесення тепла в стопі за рахунок пружніх коливань ґратниці (фононний механізм) і перенесення вільними електронами. Одержані дані свідчать про перспективність використання стопів з різним вмістом кремнію як матеріялу для вирішення задач теплообміну.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. В. В. Антипов, *Авиационные материалы и технологии*, **S**: 186 (2017).
2. О. М. Барабаш, Т. Н. Легкая, Ю. В. Мильман, Н. П. Коржова, К. Э. Гринкевич, *Металлофиз. новейшие технол.*, **31**, № 4: 545 (2009).
3. Т. М. Легка, Ю. В. Мільман, М. Міка, Н. П. Коржова, І. В. Воскобойнік, Н. М. Мордовець, *Порошковая металлургия*, **11/12**: 116 (2018).
4. Н. П. Коржова, Т. М. Легка, Н. М. Мордовець, В. І. Ничипоренко, *Металознавство та обробка металів*, **2**: 43 (2015).
5. Л. Г. Щербакова, А. В. Криницкий, Н. П. Коржова, Т. Н. Легкая, *Метал-*

лофиз. новейшие технол., **39**, № 9: 1239 (2017).
6. Д. В. Іванченко, М. М. Ямшинський, *Процеси лиття*, **2**: 16 (152).
7. М. Ю. Барабаш, А. А. Колесніченко, Д. С. Леонов, Р. В. Литвин, А. Ю. Сезоненко, І. В. Лук'яненко, Є. Г. Биба, М. М. Ямшинський, Є. М. Бобошко, *Металофіз. новітні технол.*, **45**, № 2: 169 (2023).
8. М. М. Ямшинський, В. Ю. Селівьорстов, І. В. Лук'яненко, Б. В. Кивгило, *Метал і лиття України*, **1**, № 30: 77 (2022).
9. D. V. Ivanchenko and M. M. Yamshinskij, *Int. J. Eng. Res. Sci. Technol.*, **10**, Iss. 10: 411 (2021).
10. V. S. Zolotarevsky, N. A. Belov, and M. V. Glazoff, *Casting Aluminium Alloys* (Elsevier: 2007).
11. Н. П. Коржова, Т. М. Легка, Ю. В. Мільман, К. Е. Грінкевич, Н. М. Мордовець, І. В. Воскобойнік, В. Х. Мельник, О. А. Щерецький, В. В. Бурцев, *Успіхи матеріалознавства*, **1**: 55 (2020).
12. Я. С. Уманский, Ю. А. Скаков, А. Н. Иванов, Л. Н. Расторгуев, *Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия* (Москва: Металлургия: 1982).
13. N. V. Morozovsky, Yu. M. Barabash, Yu. V. Grebelna, M. T. Kartel, Yu. I. Sementsov, and G. I. Dovbeshko, *Low Temp. Phys.*, **49**, No. 5: 604 (2023).
14. A. Yu. Sezonenko, M. M. Petryshyn, A. A. Kolesnichenko, R. V. Lytvyn, I. V. Lukianenko, Ie. G. Byba, M. M. Yamshinskij, and M. Yu. Barabash, *Results Mater.*, **21**: 100539 (2024).
15. А. А. Абрамов, М. Д. Тихомиров, *Литейное производство*, **5**: 29 (2007).
16. В. И. Трефилов, Ю. В. Мильман, С. А. Фирстов, *Физические основы прочности тугоплавких металлов* (Киев: Наукова думка: 1975).

REFERENCES

1. V. V. Antipov, *Aviation Mater. & Technolog.*, **S**: 186 (2017).
2. O. M. Barabash, T. M. Legka, Yu. V. Milman, N. P. Korzhova, and K. E. Grinkevich, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **31**, No. 4: 545 (2009).
3. T. M. Legka, Yu. V. Milman, M. Mika, N. P. Korzhova, I. V. Voskoboynik, and N. M. Mordovets, *Poroshkovaya Metallurgiya*, **11/12**: 116 (2018) (in Ukrainian).
4. N. P. Korzhova, T. M. Legka, and N. M. Mordovets, *Metaloznavstvo ta Obrobka Metaliv*, **2**: 43 (2015) (in Ukrainian).
5. L. G. Shcherbakova, A. V. Krinitskiy, N. P. Korzhova, T. M. Legka, and A. V. Samelyuk, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **39**, No. 9: 1239 (2017) (in Russian).
6. D. V. Ivanchenko and M. M. Yamshinskij, *Protsesy Lyttia*, **2**: 16 (152) (in Ukrainian).
7. M. Yu. Barabash, A. A. Kolesnichenko, D. S. Leonov, R. V. Lytvyn, A. Yu. Sezonenko, I. V. Lukianenko, Ie. G. Byba, M. M. Yamshynskyi, and Ye. M. Boboshko, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 2: 169 (2023) (in Ukrainian).
8. M. Yamshynskij, V. Selivorstov, I. Lukianenko, and B. Kyvgylo, *Metal ta Lyttia Ukrainy*, **1**, No. 30: 77 (2022) (in Ukrainian).
9. D. V. Ivanchenko and M. M. Yamshinskij, *Int. J. Eng. Res. Sci. Technol.*, **10**, Iss. 10: 411 (2021).

10. V. S. Zolotarevsky, N. A. Belov, and M. V. Glazoff, *Casting Aluminium Alloys* (Elsevier: 2007).
11. N. P. Korzhova, T. M. Legka, Y. V. Milman, K. E. Grinkevich, N. M. Mordovets, I. V. Voskoboynik, V. H. Melnik, O. A Sheretsky, and V. V. Burtsev, *Uspikhy Materialoznavstva*, **1**: 55 (2020) (in Ukrainian).
12. Ya. S. Umansky, Yu. A. Skakov, A. N. Ivanov, and L. N. Rastorguev, *Kristallografiya, Rentgenografiya i Ehlektronnaya Mikroskopiya* [Crystallography, Radiography and Electron Microscopy] (Moskva: Metallurgiya: 1982) (in Russian).
13. N. V. Morozovsky, Yu. M. Barabash, Yu. V. Grebelna, M. T. Kartel, Yu. I. Sementsov, and G. I. Dovbeshko, *Low Temp. Phys.*, **49**, No. 5: 604 (2023).
14. A. Yu. Sezonenko, M. M. Petryshyn, A. A. Kolesnichenko, R. V. Lytvyn, I. V. Lukianenko, Ie. G. Byba, M. M. Yamshinskij, and M. Yu. Barabash, *Results Mater.*, **21**: 100539 (2024).
15. A. A. Abramov, M. D. Tikhomirov, *Liteynoe Proizvodstvo*, **5**: 29 (2007) (in Russian).
16. V. I. Trefilov, Yu. V. Milman, and S. A. Firstov, *Fizicheskie Osnovy Prochnosti Tugoplavkikh Metallov* [Physical Foundations of the Strength of Refractory Metals] (Kiev: Naukova Dumka: 1975) (in Russian).

Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2024, vol. 46, No. 4, pp. 343–354
https://doi.org/10.15407/mfint.46.04.0343
Reprints available directly from the publisher

© 2024 G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Published by license under
the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics–
N.A.S. of Ukraine Publishers imprint.
Printed in Ukraine.

PACS numbers: 46.70.-p, 62.20.-x, 62.40.+i, 81.20.Wk, 81.40.Ef, 83.50.Uv

Energy and Power Parameters of Rolling Profiles for Wheel Rims of Reduced Metal Intensity with Toroidal Flanges

V. V. Chigirinsky and I. E. Volokitina*

Rudny Industrial Institute,
38, 50 Let Oktyabrya Str.,
KZ-111500 Rudny, Kazakhstan
**Karaganda Industrial University,*
30 Republic Ave.,
KZ-101400 Temirtau, Kazakhstan

The article contains experimental evaluation of technological possibilities of the wave-shaped profiles and confirmation of classical metal flow on profiles of wheel rims with toroidal flanges. The following parameters are recorded during the experiments: temperature in the finishing gauge, rolling force in the 2nd, 4th, 6th and 7th passes, current, voltages and motor speeds. The analysis of experimental data of rolling profiles 7.0-20-03, 8.5-20-03 and 228G-020-01 shows that technological capabilities of special rolled products for the truck wheel rims with wavy central part are much higher than serial profiles, where the central zone is of rectangular shape. It is possible to reduce the mass of profiles without changing the process parameters, *i.e.*, rolling force and torque. This indicates the influence of additional and kinematic effects on the deformation zone in real production conditions.

Key words: wheel rims, metal intensity, energy and power parameters, rolling, workpiece.

У статті проведено експериментальну оцінку технологічних можливостей профілів хвилеподібної форми та підтвердження класичної течії металу на профілях ободів коліс з тороїдальною посадковою полицею. Під час експериментів реєстрували такі параметри: температуру в чистовому калібрі, зусилля прокатки у 2-му, 4-му, 6-му і 7-му проходах, струм, напругу та число оборотів двигуна. Аналіза експериментальних даних прокат-

Corresponding author: Iryna Yevgeniyevna Volokitina
E-mail: i.volokitina@alservice.kz

Citation: V. V. Chigirinsky and I. E. Volokitina, Energy and Power Parameters of Rolling Profiles for Wheel Rims of Reduced Metal Intensity with Toroidal Flanges, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **46**, No. 4: 343–354 (2024). DOI: 10.15407/mfint.46.04.0343

ки профілів 7.0-20-03, 8.5-20-03 і 228G-020-01 показує, що технологічні можливості спеціяльного прокату для ободів коліс вантажних автомобілів із хвилеподібною центральною частиною значно вищі за серійні профілі, в яких центральна зона має прямокутню форму. Можливе пониження маси профілів без зміни параметрів процесу, тобто сили та моменту прокатки. Це свідчить про вплив ефектів додаткового та кінематичного впливу на осередок деформації в реальних умовах виробництва.

Ключові слова: обід колеса, металомісткість, енергосилові параметри, прокатка, заготовка.

(Received 8 October, 2023; in final version, 15 November, 2023)

1. INTRODUCTION

Currently, many spheres of activity can be considered knowledge-intensive, *i.e.*, areas where the latest achievements and developments in science and technology are used.

There are industries that provide output of products with high consumer properties or are of priority importance for the state due to one or another reason. Significant capital investment is involved in these productions either in order to maximize profits or to obtain acceptable specifications of the manufactured item. This makes it possible to obtain new quality at reduced costs by means of advanced technologies, equipment, materials, and to ensure highly profitable production with priority development and economic growth [1–6]. In our case, it can be argued that such priorities include the automotive and aircraft engine industries.

The automotive industry ranks first in terms of special rolled products used. The profiles used can be divided into groups: wheel, periodic, spring, for door hinges, and other parts [7–9].

Designs of automotive wheel rims for various purposes are distinguished by the number of main structural elements: rim base, lock ring and side ring. All of these elements have different designs depending on their purpose. The rim base, designed with an inclination of 5° to the flange, is necessary to keep the tire on the rim by tensioning it. Recently, a rim design with a 15° flange for truck, bus, and trolleybus wheels has become more prevalent.

In the automotive industry during the production of truck and bus wheels, the direction of improving designs by reducing the rim components is clearly indicated (Fig. 1). This makes it possible to reduce the metal intensity of the rim by reducing the overlap of the rim parts. There is a need to create a single-piece rim. In addition, the profile itself undergoes changes towards a more rational distribution of metal across the cross-section. This ensures a certain degree of its equal strength: more stressed areas are strengthened and less stressed ele-

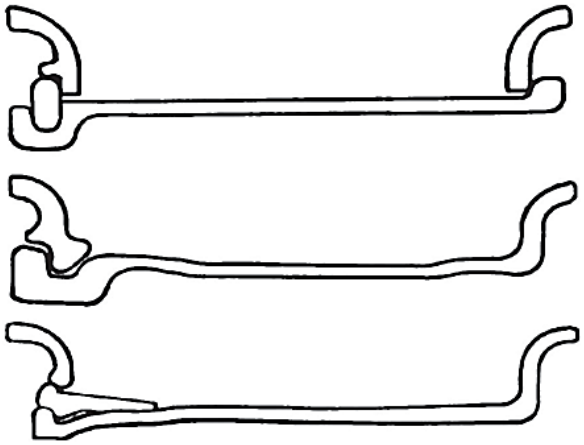


Fig. 1. Hot-rolled profiles of truck wheel rims.

ments are thinned.

The upper profile of the rim has an equal-thickness cross-section, although the load is different across the widths. The lower profile is designed so that the section has different thicknesses across the width and a 5° flange on which the tire bead sits with interference. In this case, the side ring in the first design is made for this structure in one piece with the centre part.

There is no need to make a holding ledge that significantly reduces the metal intensity of the profile. The third profile from the top has a thinning in the central part; it is minimally stressed during operation. The wavy lower surface of the centre part of the next profile allows for additional lightness and, at the same time, ensures a minimum temperature drop during rolling in the last finishing pass, which improves its technological capabilities.

This trend in the development of truck wheel rims, taking into account operational and technological features, means that the improvement of designs is associated with a reduction in the weight of the wheel, its individual parts, including special rolled products. Reducing the mass of the unsprang part of the vehicle results in reduced fuel consumption, tire and road wear, and increased life of the wheel-mounting hub [10].

Rolling of non-standard profiles in metallurgical production allows saving metal at the consumer, where it is used as a workpiece for the manufacture of products of the machine-building complex. This case considers the 'junction' of metallurgical and machine-building production where many technological and technical issues can be solved. For example, the creation and development of profiles of special rolled products with reduced metal intensity involves solving a number of

issues in different areas of production: in mechanical engineering—issues related to the strength of the product, operational capabilities; in metallurgy—technological issues that determine the possibility of its production and economic feasibility. Comprehensive consideration of peculiarities allows for a new approach to solving emerging problems. In this case, a new task definition and new approaches to its solution appear. Rolling profile, the shape of which is determined by the parameters of loading during operation, can take into account the technological features of production, in particular, plastic deformation. The new statement concerns the technological design of special rolled products, for which it is necessary to know the peculiarities of the technological process, the regularities of plastic flow of metal, stressed and strained conditions [11–15].

Consideration of plastic deformation effect on the shape of rolled products allows not only to predict the result, but also to control the process of deformable medium shape change on the basis of physical and mathematical models. The tool for such control can be the strain non-uniformity in both width and length of the deformation zone.

The theoretical and experimental research results presented in this paper show that there are effects that stabilize the process and high-quality product under conditions of non-uniform plastic deformation of thin-walled profiles.

2. EXPERIMENTAL

Experimental evaluation of technological possibilities of wave-shaped profiles and confirmation of classical metal flow was also carried out on profiles of wheel rims with toroidal flange. The following parameters were recorded during the experiments: temperature in the finishing gauge, rolling force in the 2nd, 4th, 6th and 7th passes, current, voltages and motor speeds.

To measure the rolling force, membrane-type load cells made of 40KhN steel were designed and manufactured. They worked in conjunction with a strain gauge amplifier and a magnetoelectric oscillograph.

A device consisting of a photoelectric pyrometer, isolation transformer, voltage stabilizer, and oscillograph was used to measure the temperature. The loading of the motor of the finishing stand was investigated using an oscilloscope.

3. RESULTS AND DISCUSSION

Generalized values of process parameters for profiles 228G-020 and 228G-020-01 with the groove depth of 1.0 mm are presented in Table 1.

TABLE 1. Results of experimental data during rolling of serial and lightweight profiles 228G-020 and 228G-020-01 (groove depth of 1.0 mm).

Rolling parameters	Profile type	Pass Nos.						
		1	2	3	4	5	6	7
Reduction, mm	Lightweight	30.9	27.9	15.1	10.8	4.3	2.7	1.0
	Serial	30.9	27.9	15.1	10.8	3.8	2.6	1.2
Temperature, °C	Lightweight	–	–	–	–	–	–	860–980
	Serial	–	–	–	–	–	–	895–982
Rolling force, MN	Lightweight	–	2.9–3.7	–	3.2–4.2	–	1.9–2.5	2.2–3.1
	Serial	–	2.6–3.8	–	2.8–3.5	–	2.1–2.6	2.2–3.1
Motor capacity, kW	Lightweight	–	–	–	–	–	–	517–802
	Serial	–	–	–	–	–	–	525–781
Rolling torque, MNm	Lightweight	–	–	–	–	–	–	0.03–0.05
	Serial	–	–	–	–	–	–	0.03–0.04
Torque arm ratio	Lightweight	–	–	–	–	–	–	0.33–0.45
	Serial	–	–	–	–	–	–	0.34–0.43

The research results for serial and lightweight profiles were compared for the following parameters: absolute reductions, rolling temperature in the finishing pass, rolling force, motor capacity, rolling torque, torque arm ratio. The obtained data of lightweight and serial profiles did not have significant differences. At actually, the same strain mode of rolling the temperature changed insignificantly: on the lightened profile it slightly decreased from 895–982°C to 860–982°C. Higher temperature of the end of rolling, compared to profiles 7.0-20-03 and 8.5-20-03, is explained by higher weight of profiles and simplified configuration of the profile (similar to strip rolled product). The rolling force for the experimental and serial rim is in the same range of 2.2–3.1 mN, although a more detailed analysis shows that there is a bias in the number of measurements towards a lower force magnitude, when rolling a lightweight rim. Other process indicators are also within approximately the same limits: capacity is 517–802 kW and 525–781 kW; torque is 0.03–0.05 MNm and 0.03–0.04 MNm; torque arm ratio is 0.33–0.45 and 0.34–0.43. The workpiece used in rolling for the studied profiles was of the same thickness and equal to 100 mm, which did not introduce additional difficulties in analysing the result. When the rolling end temperature is lowered, the forces are virtually the same. Stability of indicators for lightweight and serial profiles proves the effectiveness of kinematic influence on the rolling process. On these profiles, this conclusion is stronger, since the experimental data were obtained, as can be seen from Table 1, at comparable strain regimes. In addition, the process of obtaining the required profile thickness did not cause any major problems, rolling was stable and without delays.

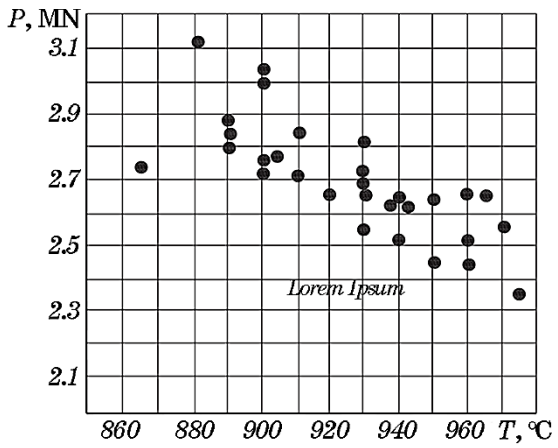


Fig. 2. Dependence of rolling force on temperature in finishing pass of profile 228G-020.

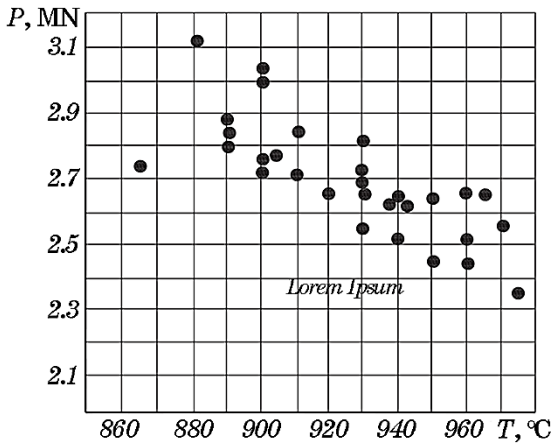


Fig. 3. Dependence of rolling force on temperature in finishing pass of profile 228G-020-01.

Let us consider the experimental data in more detail to analyse the validity of the obtained result. Figures 2 and 3 show the values of rolling force depending on temperature for serial profile 228G-020 and lightweight 228G-020-01, which support the generally accepted ideas: with increasing temperature the rolling force decreases, and the data scatter is less than for profiles with a tapered flange.

Figures 4 and 5 for profiles 228G-020 and 228G-020-01 show the dependence of rolling torque on temperature. The data demonstrate that no such dependence is observed for profiles with tapered flange. There is no effect of temperature on the rolling torque within the exist-

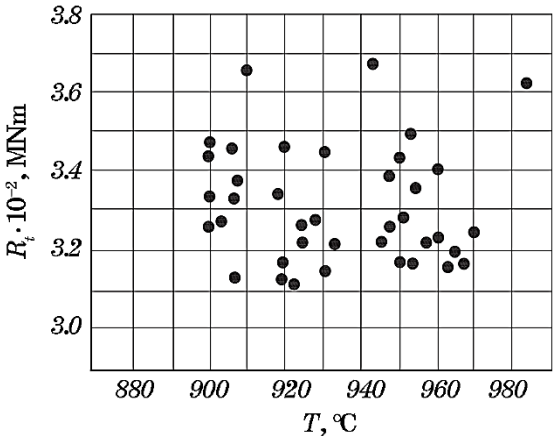


Fig. 4. Dependence of rolling torque on temperature in finishing pass of profile 228G-020.

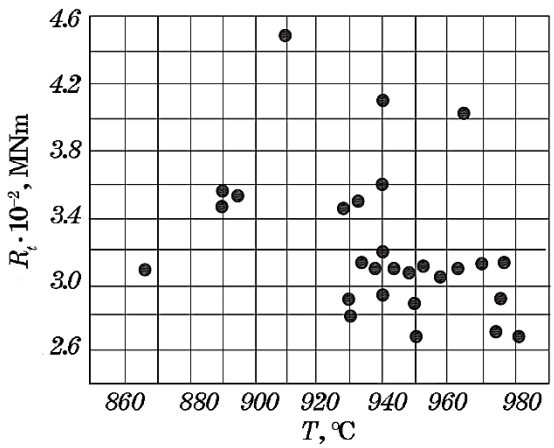


Fig. 5. Dependence of rolling torque on temperature in finishing pass of profile 228G-020-01.

ing process parameters, while reducing the metal intensity.

The dependences of rolling torque on temperature have a correlation factor significantly less than 0.5. If there is no such dependence, then, the arm should increase with the increase of metal rolling temperature. For profiles with a tapered flange, the arm and rolling torque arm ratio also depend linearly on the temperature and increase with its increase.

This is due to redistribution of yield strength along the length of the deformation zone. Processing of experimental data for profiles with toroidal flanges showed a similar qualitative dependence.

Figures 6 and 7 show the data of torque arm ratio ψ from temperature T at rolling in the last finishing pass. The relationship between the above factors can be seen for serial and lightweight profiles. This is an important conclusion, as it suggests that rolling of lightweight profiles will not be accompanied by deterioration of the above parameters.

In addition to additional and kinematic effects on the deformation zone, there is a peculiarity of energy character when the proposed strain changes in the plastic flow do not lead to additional energy inputs.

This allows, for example, when cooling the rolled product to obtain

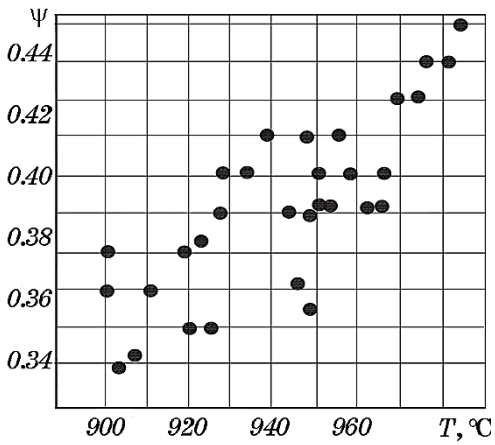


Fig. 6. Dependence of rolling torque arm ratio on temperature in the finishing pass of profile 228G-020.

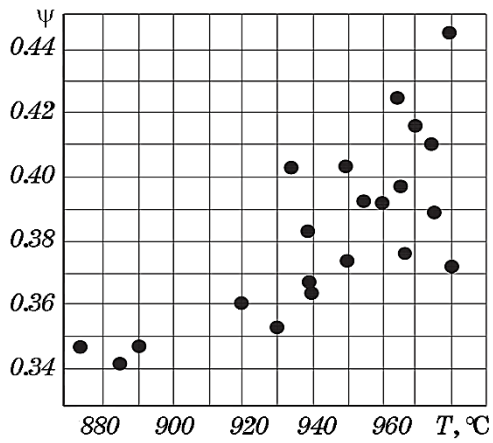


Fig. 7. Dependence of rolling torque arm ratio on temperature in finishing pass of profile 228G-020-01.

the required structure, to ensure that the energy costs of the process remain unchanged, while the rolling force can vary significantly.

The obtained result seems to be reliable, since it does not contradict the generally accepted provisions of the rolling theory. The validity of obtained experimental data, in addition to qualitative comparisons, should be assessed by quantitative indicators.

For the profiles, in addition to the parameters presented above, the motor armature current was measured using different measuring equipment. Then, the data from them were well correlated with each other after processing.

Processing of the obtained results by methods of mathematical statistics allowed obtaining empirical dependences of rolling force in the seventh pass.

For the profile 228G-020,
rolling force on motor armature current

$$P_7 = 3.007 + 238.257 I_7,$$

rolling force on strip temperature [in tons]

$$P_7 = 639.019 + 0.419 T_7, \tag{1}$$

torque arm ratio on strip temperature

$$\psi_7 = 0.00077 T_7 - 0.34300.$$

For the profile 228G-020-01,
rolling force on motor armature current

$$P_7 = 3.010 + 236.100 I_7,$$

rolling force on strip temperature [in tons]

$$P_7 = 651.594 + 0.412 T_7, \tag{2}$$

torque arm ratio on strip temperature

$$\psi_7 = 0.00081 T_7 - 0.37900.$$

The correlation ratios for currents are of 0.83 and 0.82, for temperature, they are of 0.67 and 0.74, and for torque arm ratio, they are of 0.79 and 0.71. At a temperature of 900 °C, the torque arm ratio for the investigated profiles takes the corresponding value equal to 0.35. In this case, the resultant of forces is located closer to the outlet of the deformation zone.

High convergence of the studied data indicates the reliability of the obtained experimental results.

Comparing expressions (1) and (2), we make sure that they differ insignificantly in numerical values that confirms the same order of obtained experimental values on serial and experimental profiles. Using formulas (1) and (2) by measured values of current force, it is possible to determine the rolling force of profiles with toroidal flange of different weight. If the stiffness of the mechanical system is known, we can determine its elastic deformation and thickness of the yielding strip. By knowing the force and the arm ratio, we can get the rolling torque.

Comparison of data for profiles with toroidal and tapered flanges shows that there is a difference between them.

The temperature for profiles 7.0-20-03 and 8.5-20-03 is significantly lower than for profiles 228G-020. This is due to the greater weight of the profile, and the lower value of the torque arm ratio ψ for toroidal flanges compared to profiles with tapered flanges is due to the complex shape of the cross section. This also applies to the rolling force, which is greater on profiles with complex configurations. Such a comparison of experimental data for different geometrically shaped profiles is useful if there are general trends that confirm the same qualitative result, which includes the plastic flow effect. Comparison of experimental data on profiles indicates that temperature reduction on lightweight profiles does not lead to an increase in the energy parameters of the rolling process.

To develop the optimal weight of profiles at mill 550 of Petrovsky plant several modifications of profile 228G-020- 01 of different weight were rolled, with different parameters of wave central zone with depth of groove $h_{\text{groove}} = 0.8$, 1.0, 1.2 mm. The influence of the groove depth, *i.e.*, the profile weight, on the process parameters was studied.

Table 2 shows the values of the rolling process parameters obtained from the motor armature current at groove depths of 0.8 mm and 1.2 mm.

Table 2 shows that the force and rolling torques at groove depth of 1.2 mm have increased in comparison with the data of Table 1. From the technological point of view, it has complicated the process of obtaining the profile in shape and size, increased energy consumption, mill downtime associated with its readjustment, consumption of rolls. There were problems with obtaining the specified roll thickness in finishing passes. From the technological point of view, the profile weight with groove depth of 1.0 mm was more preferable.

Rolling of the profile with depth $h_{\text{groove}} = 0.8$ mm did not cause concerns; however, such a 'sinusoid' was worn out faster.

4. CONCLUSION

All the data given in this article indicate that the manufacture of pro-

TABLE 2. Values of rolling force and torques obtained by motor armature current for profile 228G-020-01.

Process parameters	Pass Nos.	
	6	7
	Groove depth of 0.8 mm	
Rolling force, MN	1.85–2.40	2.00–3.20
Rolling torque, MNm	0.023–0.028	0.025–0.041
	Groove depth of 1.2 mm	
Rolling force, MN	1.88–2.56	2.52–3.44
Rolling torque, MNm	0.023–0.031	0.031–0.046

files with a wave-shaped central part in real production conditions confirms the effects of plastic flow and allows realizing the process of stable rolling of thin-walled products with reduced metal intensity. The wavy shape of the central part of the finishing profile increases the web width, which reduces the partial drawing of the heavily reduced element. Redistribution of partial drawings across the strip width changes the nature of the stress state.

As a result, we have a new quality associated with the rolling of thin-walled products; the process of plastic deformation (rolling) can be controlled, improving its technological capabilities. On the other hand, the features of shape change determine the design of the profiles themselves, and there is a possibility of their technological design. This problem has been successfully solved for special profiles for wheels of trucks, buses and trolleybuses.

REFERENCES

1. A. A. Nester, O. S. Drobot, and O. O. Nikitin, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 4: 471 (2022) (in Ukrainian).
2. I. E. Volokitina, *Prog. Phys. Met.*, **24**, No. 3: 593 (2023).
3. I. E. Volokitina, A. V. Volokitin, M. A. Latypova, V. V. Chigirinsky, and A. S. Kolesnikov, *Prog. Phys. Met.*, **24**, No. 1: 132 (2023).
4. A. Denissova, Y. Kuatbay, and Y. Liseitsev, *Case Studies in Construction Materials*, **19**: e02346 (2023).
5. I. E. Volokitina, *Prog. Phys. Met.*, **24**: No. 3: 593 (2023).
6. A. Bychkov and A. Kolesnikov, *Metallogr. Microstruct., Anal.*, **12**: 564 (2023).
7. V. V. Chigirinsky, Y. S. Kresanov, and I. E. Volokitina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**: No. 4: 467 (2023).
8. N. V. Ruzanov, M. A. Bolotov, V. A. Pechenin, and E. R. Matek, *Key Eng. Mater.*, **769**: 242 (2018).
9. V. V. Chigirinsky, Y. S. Kresanov, and I. E. Volokitina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**: No. 5: 651 (2023).
11. Yu. Ya. Meshkov and G. P. Zimina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6:

807 (2022) (in Ukrainian).
12. V. Chigirinsky and O. Naumenko, *East.-Eur. J. Enterp. Technol.*, **5**: 27 (2019).
13. O. I. Gorbatov, Yu. N. Gornostyrev, P. A. Korzhavyi, and A. V. Ruban, *Phys. Met. Metallogr.*, **117**: 1293 (2016).
14. N. V. Ruzanov, M. A. Bolotov, V. A. Pechenin, N. D. Pronichev, and E. R. Stepanova, *Procedia Eng.*, **176**: 529 (2017).
15. B. Sapargaliyeva, A. Agabekova, G. Ulyeva, A. Yerzhanov, and P. Kozlov, *Case Studies in Construction Materials*, **18**: e02162 (2023).

Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2024, vol. 46, No. 4, pp. 355–369
https://doi.org/10.15407/mfint.46.04.0355
Reprints available directly from the publisher

© 2024 G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Published by license under
the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics–
N.A.S. of Ukraine Publishers imprint.
Printed in Ukraine.

PACS numbers: 46.32.+x, 46.50.+a, 62.20.fk, 62.20.mj, 62.20.mm, 62.20.mt, 81.40.Np

Механічна стабільність і крихкість металів і стопів. Ч. 2. Роль механічних властивостей

Ю. Я. Мєшков, Г. П. Зіміна

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 36,
03142 Київ, Україна

Встановлено закономірності впливу міцности та пластичности криць на ефективність окрихчувальної дії концентраторів напружень (КН) у вигляді тріщин втоми у стандартних зразках для визначення тріщиностійкости металів і стопів. Для аналізи застосовували спеціяльні показники, яких було запропоновано в Ч. 1 цього повідомлення, а саме: резерв міцности B_r і ефективний коефіцієнт концентрації напружень КН α_{ef}. Показано, що умовою втрати механічної стабільности металу (крихкости) під дією КН є перевищення α_{ef} над B_r, що означає руйнування зразка з КН за середнього напруження, яке не перевищує границю плинности $\sigma_{0,2}$ металу. Встановлено закономірності впливу міцности $\sigma_{0,2}$ на показники резерву міцности B_r і величину ефективного коефіцієнта концентрації напружень α_{ef}, спричиненого зростанням міцности криць у межах $\sigma_{0,2} = 140–500$ МПа (в результаті пониження температури) і $\sigma_{0,2} = 140–2200$ МПа за кімнатної температури (в результаті зміни хемічного складу криці та термооброблення). Встановлено, що руйнувальна ефективність КН α_{ef} реґулюється безпосередньо величиною резерву міцности B_r, який, в свою чергу, пов'язаний з характеристикою міцности $\sigma_{0,2}$. Таким чином, пластичність нівелює окрихчувальну ефективність КН (α_{ef}) не сама по собі, а на фоні показників міцности ($\sigma_{0,2}$): більш виразно для низькоміцних і менш ефективно для високоміцних криць.

Ключові слова: міцність, резерв міцности, механічна стабільність, крих-

Corresponding author: Halyna Petrivna Zimina
E-mail: zimingal28@gmail.com

G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine

Citation: Yu. Ya. Meshkov and H. P. Zimina, Mechanical Stability and Brittleness of Metals and Alloys. Pt. 2. The Role of Mechanical Properties, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **46**, No. 4: 355–369 (2024) (in Ukrainian). DOI: 10.15407/mfint.46.04.0355

кість, концентратор напружень.

Regularities of the influence of strength and ductility of steels on the embrittlement effect of stress raisers (SR) as fatigue cracks in standard specimens for determining the fracture toughness of metals and alloys are ascertained. Special indices proposed in Pt. 1 of this report are used for this analysis, namely: strength margin, B_r, and the effective coefficient of stress raise, α_{ef}. As shown, an excess of α_{ef} over B_r is the condition for mechanical instability of metal (brittleness) under the SR influence; this means fracture of the specimen with SR at the average stress that does not exceed the yield strength of metal, $\sigma_{0.2}$.Regularities are found for the effect of strength, $\sigma_{0.2}$, on indices of strength margin, B_r, and the value of the effective stress raise coefficient, α_{ef}, due to an increase in strength of steels, $\sigma_{0.2}$, within the range 140–500 MPa (as a result of decrease in temperature) and within the range 140–2200 MPa at room temperature (as a result of changing the chemical composition of steel and heat treatment). As established, the SR destructive effect, α_{ef}, is governed directly by the value of strength margin, B_r, which, in turn, is related to the strength characteristic, $\sigma_{0.2}$. Thus, ductility reduces SR embrittlement effect, α_{ef}, not by itself, but against the background of yield strength, $\sigma_{0.2}$, more strongly for low-strength steels and less strongly for high-strength steels.

Key words: strength, strength margin, mechanical stability, brittleness, stresses' raiser.

(Отримано 11 липня 2023 р.; остаточн. варіянт — 15 липня 2023 р.)

1. ВСТУП. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

У Ч. 1 даної роботи [1] було показано, що стан крихкости будь-якого твердого тіла означає нестабільність його міцности, яка залежить не стільки від природи матеріялу, скільки від способу його навантаження й особливо від ступеня неоднорідности напруженого стану, спричиненої концентраторами напружень (КН). У металевих матеріялів завдяки наявності у них пластичности є природній захист від цього виду нестабільности у вигляді РСМ — резерву стабільної міцности (або зламостійкости) B_r [2–5], що поглинає неоднорідність поля напружень, чим істотно пом'якшує руйнувальну силу КН:

$$B_r = \frac{S_K}{\sigma_{0,2}}, \tag{1}$$

де S_K — істинне напруження руйнування, $\sigma_{0,2}$ — умовна границя плинности. Але це можливе лише за умови, якщо розмах амплітуди неоднорідности НДС не перевищує величину B_r.

Для природньо крихких металів, що руйнуються в умовах чисто пружніх деформацій, руйнувальна ефективність КН визначається Нейберовим коефіцієнтом концентрації напружень α_σ [6, 7]. У ме-

талів наявність резерву міцности B_r частково або цілком спотворює руйнувальну силу КН, закладену в суто геометричних параметрах концентратора α_σ, тому що в зоні локальної пластичности КН формується специфічна зона локального перенапруження металу над рівнем границі плинности $\sigma_{0,2}$. Якщо критичний рівень цього перенапруження повністю поглинає резерв стабільности міцности B_r, це викликає нестабільність граничної міцности металу S_K і призводить до крихкої поведінки металу під дією КН. Отже, у пластичному металі концентратор діє як ефективний дестабілізатор міцности за рахунок створеного ним локального перенапруження. Мірою ефективности перенапруження може слугувати співвідношення двох граничних міцностей самого металу (S_K) і металевого тіла з КН — σ_{NF} (σ_{CO}) (σ_{NF} — середнє номінальне напруження руйнування зразка з КН за розтягування, σ_{CO} — за згинання зразка):

$$\alpha_{ef} = S_K/\sigma_{NF}\,. \tag{2}$$

Параметер α_{ef} можна назвати, на відміну від коефіцієнта концентрації напружень α_σ, показником руйнувальної ефективности концентратора напружень (ЕКН); між ними є очевидне співвідношення: $\alpha_{ef} < \alpha_\sigma$.

Слід зауважити, що ЕКН α_{ef} є особливим параметром концепції механічної стабільности металів, оскільки залежить не лише від геометричних параметрів КН або від параметрів НДС в зоні пластичности КН, але й від механічних властивостей металу. Вплив основних механічних властивостей криць $\sigma_{0,2}$ і B_r на α_{ef} становить задачу даної статті; роль чинника НДС буде розглянуто в «Ч. 3».

2. МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТА ПАРАМЕТРИ МЕХАНІЧНОЇ СТАБІЛЬНОСТИ КРИЦЬ B_r І α_{ef}

В роботі [1] було показано, що збільшення резерву стабільности міцности B_r криці на зразках з КН не обов'язково супроводжується зростанням критичного значення РСМ під час в'язко-крихкого переходу B_{rc} при T_C, коли номінальне напруження руйнування зразка з КН σ_{NF} збігається з границею плинности криці $\sigma_{0,2}$ (рис. 1):

$$\sigma_{NF}, \sigma_{CO} = \sigma_{0,2}\,. \tag{3}$$

Умова (3) з урахуванням (1) і (2) означає, що критерій крихкости для зразка з КН (3) у більш узагальненому вигляді буде:

$$\alpha_{ef} = B_r\,. \tag{4}$$

Критичні значення параметрів ЕКН і РСМ при T_C відповідно бу-

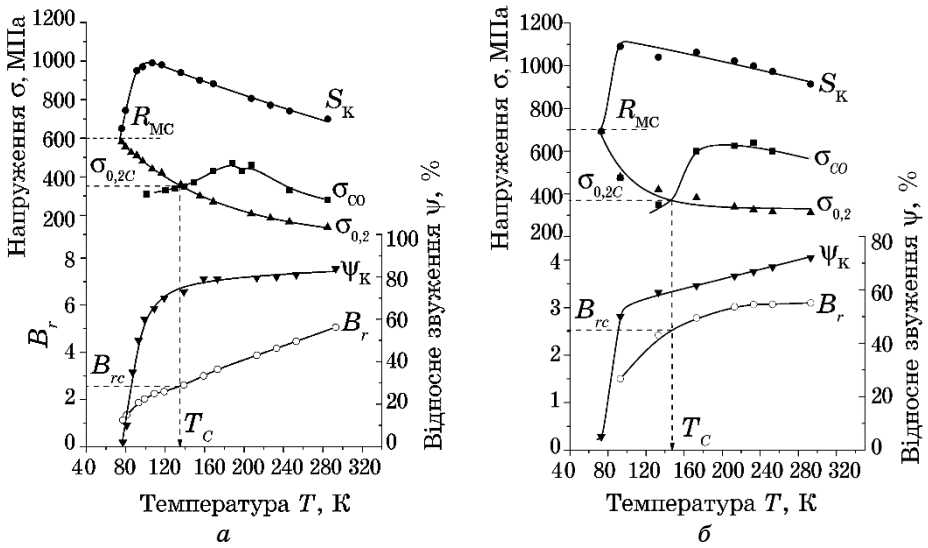


Рис. 1. Температурні залежності механічних характеристик заліза α-Fe (*а*) і криці 10ХСНД (*б*) за даними [8]. $\sigma_{0,2}$ — границя плинности, $S_К$ — істинне напруження руйнування, $\psi_К$ — відносне звуження під час розриву, B_r — резерв міцности, σ_{CO} — номінальне напруження руйнування зразка з тріщиною.

Fig. 1. Temperature dependences of the mechanical characteristics of α-Fe (*a*) and steel 10ХСНД (*б*) according to [8]. $\sigma_{0.2}$ is yield strength, $S_К$ is true fracture stress, $\psi_К$ is reduction in area when breaking, B_r is strength margin, σ_{CO} is nominal fracture stress of specimen with a crack.

дуть $\alpha_{efc} = B_{rc}$.

В [1] встановлено лише загальну тенденцію щодо зростання показників α_{efc} і B_{rc} з підвищенням B_r, але на цю закономірність істотно впливає рівень міцности криці $\sigma_{0,2}$ і особливо НДС в зоні дії КН.

Нижче більш детально буде розглянуто роль показника міцности $\sigma_{0,2}$ у його впливі на ефективність окрихчувальної дії КН (α_{ef}) і на критерій крихкости через показник $\alpha_{efc} = B_{rc}$. Будемо розрізняти два способи підвищення міцности $\sigma_{0,2}$ криць — від пониження температури («температурний» спосіб), від виду термооброблення та хемічного складу криці («структурний» спосіб), тому що від способу зміцнення залежить інтенсивність впливу границі плинности $\sigma_{0,2}$ на показники резервів міцности: $K_В$ (стабільність крихкої міцности R_{MC}) [9] і B_r (стабільність в'язкої міцности $S_К$) [10]. Це наводить на думку про те, що не сама температура T, а спричинений нею збільшений рівень границі плинности криці $\sigma_{0,2}$ викликає пониження показників $K_В$ і B_r. Було показано [2], що «температурний» спосіб зміцнення криць, коли з пониженням температури зростає лише

границя плинности $\sigma_{0,2}$, а крихка міцність $R_{МС}$ не змінюється [9], призводить до пришвидшеного зменшення показника резерву стабільности — крихкої міцности $K_В$ [3]:

$$K_В = \frac{R_{МС}}{\sigma_{0,2}}. \quad (5)$$

За «структурного» способу зміцнення криць разом з границею плинности $\sigma_{0,2}$, як правило, зростають одночасно крихка ($R_{МС}$) і в'язка ($S_К$) граничні міцности; отже, темпи пониження показників резервів міцности обох видів, як крихкої ($K_В$), так і в'язкої (B_r), істотно зменшуються, а тому критичні показники критерію крихкости криць (3) зміщуються до більш високих значень $\sigma_{0,2C}$.

На рисунку 1 представлено одержані в роботі [10] температурні залежності механічних властивостей армко-заліза (α-Fe) та криці 10ХСНД на гладких зразках ($\sigma_{0,2}$, $S_К$) і на зразках з тріщиною втоми за згинання (σ_{CO} — номінальне напруження руйнування), яких достатньо, щоб оцінити потрібні параметри B_r по (1) і α_{ef} по (2).

На рисунку 2 наведено результати обрахунку параметрів $P_{СМ}$ і $E_{КН}$ для досліджених в [10] трьох металів — α-Fe, криць 10ХСНД і

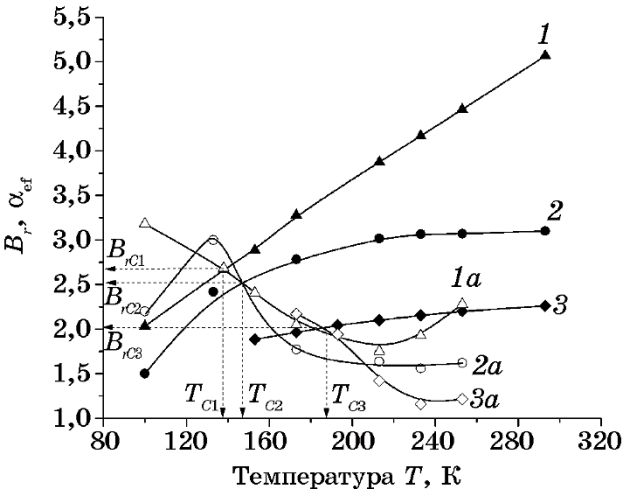


Рис. 2. Температурні залежності резерву міцности (зламостійкости) B_r (криві *1–3*) і коефіцієнта ефективности напруження α_{ef} (криві *1а–3а*) для криць: *1* — залізо (α-Fe), *2* — 10ХСНД, *3* — АК-35 (за даними роботи [10]). B_r — для гладких зразків; α_{ef} — для зразків з тріщиною втоми.

Fig. 2. Temperature dependences of the strength margin (break resistance) B_r (curves *1–3*) and of the effective coefficient of stress raise α_{ef} (curves *1a–3a*) for steels: *1*—iron (α-Fe), *2*—10ХСНД, *3*—АК-35 (according to [10]). B_r—for unnotched specimens; α_{ef}—for specimens with fatigue crack.

АК-35, які сильно відрізняються міцністю ($\sigma_{0,2} = 140$, 310 і 1027 МПа відповідно), за великих показників пластичности та міцности ($B_r = 5{,}3$ і 2,3 для $T_к = 300$ К).

З рисунку 2 видно, що за «температурного» способу зміцнення криць має місце монотонне пониження резервів стабільности міцности B_r, але спостерігається зовсім немонотонний і дещо хаотичний характер зміни ефективности руйнувальної дії концентратора α_{ef}. В зонах стабільної міцности ($\sigma_{NF} > \sigma_{0,2}$ для $T > T_C$) показники α_{ef} різних за міцністю криць (п.п. 1*a*–3*a* на рис. 2) в цілому корелюють з відповідним рівнем B_r, так само як і критичні значення ЕКН α_{efc} для відповідних T_C. В даному випадку руйнувальна ефективність КН, яку представлено коефіцієнтом ефективности ЕКН α_{ef}, реґулюється в більшій мірі величиною B_r, тобто резервом міцности, а не величиною самої міцности $\sigma_{0,2}$. Нагадаємо, що саме резерв міцности B_r відображає міру пластичности стопу в поєднанні з властивістю деформаційного зміцнення і тим самим надає йому особливу властивість — зламостійкість [2–5], яка забезпечує виробу з КН захист від крихкости. Отже, зламостійкість (B_r) відіграє свою захисну роль за рахунок властивости пластичности та відображає це у прямому кількісному вимірі B_r.

Більш виразно роль міцности в окрихчувальній ефективності КН

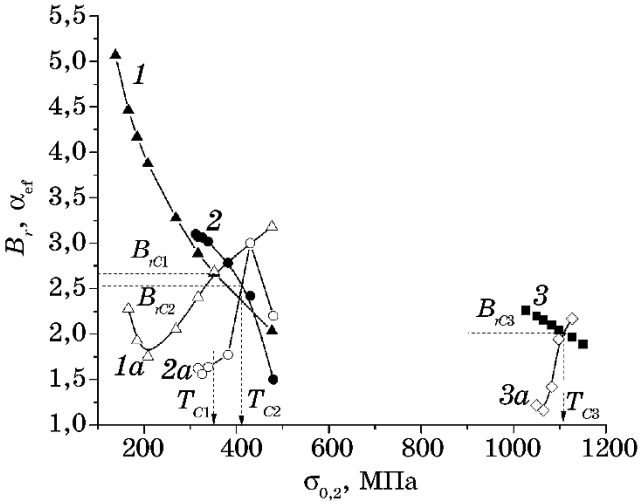


Рис. 3. Залежності параметрів B_r (криві *1*, *2*, *3*) і α_{ef} (криві *1a*, *2a*, *3a*) від міцности $\sigma_{0,2}$ криць: *1* — α-Fe, *2* — 10ХСНД, *3* — АК-35 (за [10]). Параметер α_{ef} для зразків з тріщинами втоми.

Fig. 3. Dependences of the parameters B_r (curves *1*, *2*, *3*) and α_{ef} (curves *1a*, *2a*, *3a*) on yield strength $\sigma_{0.2}$ for steels: *1*—α-Fe, *2*—10ХСНД, *3*—АК-35 (by [10]). Parameter α_{ef} is for specimens with fatigue crack.

за двох способів підвищення показника міцности криці $\sigma_{0,2}$ виявляється, якщо зміну параметра α_{ef} продемонструвати в координатах «α_{ef}–$\sigma_{0,2}$» (рис. 3). Чітко видно, що високоміцна криця АК-35 ($\sigma_{0,2} = 1027$ МПа) мало відрізняється від криці 10ХСНД ($\sigma_{0,2} = 310$ МПа) критичним значенням α_{efc}, тому що B_{rc} для них складає величини 2,5 і 2,0 відповідно, причому критичне значення міцности $\sigma_{0,2C}$ для T_C різняться дуже сильно — 1100 і 420 МПа (рис. 3). Отже, роль міцности в окрихченні криці не є прямою, а опосередкованою — через резерв міцности B_r.

Для порівняння на рис. 4 наведено аналогічні залежності параметрів B_r і α_{ef} за «структурного» способу зміцнення криць за кімнатних температур $T_к$. Необхідні для цього величини B_r і α_{ef} були розраховані нами для криць різних видів класів міцности (включаючи і зварні шви), зведених в оглядовій роботі [11] за даними експериментальних досліджень різних авторів (табл. 1). В згаданій роботі [11] використовувалися дані з цитованих робіт, де були наведені необхідні для наступної аналізи показники міцности $\sigma_{0,2}$, $S_К$ і напруження руйнування σ_{CO} на зразках з тріщиною, призначених для визначення показників тріщиностійкости K_{Ic} [12].

Результати розрахунку величини B_r і α_{ef} для криць різної міцности наведено в табл. 1, запозиченій з роботи [11], де були розраховані

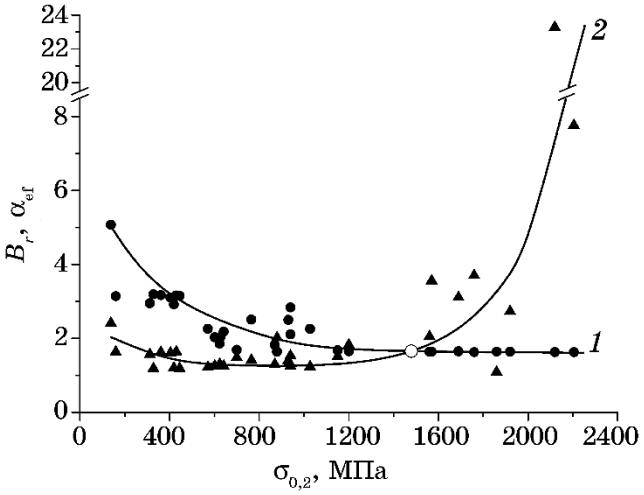


Рис. 4. Залежність параметрів B_r (1) і α_{ef} (2) від міцности $\sigma_{0,2}$ для $T_к = 300$ К для криць різного складу та різних видів термооброблення за даними роботи [11]: *1* — гладкі зразки, *2* — зразки з тріщиною втоми.

Fig. 4. Dependences of B_r (1) and α_{ef} (2) on yield strength $\sigma_{0.2}$ at $T_к = 300$ K for steels of different composition and for different types of heat treatment (according to [11]): *1*—for unnotched specimens, *2*—for specimens with fatigue crack.

ТАБЛИЦЯ 1. Механічні властивости криць і зразків з тріщиною за згину [11].

TABLE 1. Mechanical properties of steels and specimens with crack at bending.

№ п/п	КС	Оброблення	$\sigma_{0.2}$, МПа	ψ_K, %	S_K, МПа	B_r	σ_{CO}, МПа	B_{rCO}	α_{ef}
1	АК-35 [2]	Стан поставки	1027	75,0	2321	2,26	1820	1,83	1,23
2	α-Fe [2]	Г 1323 К, 2 год. ПО	138	83,8	700	5,07	290	2,10	2,41
3	10ХСНД [2]	Г 1373 К, 2 год. ПО	312	72,0	920	2,95	590	1,88	1,56
4	Ст. 3 сп. [2]	Г 1373 К, 2,75. ПО	160	71,7	502	3,14	307	1,92	1,63
5	10Х15Н27Т3В2МР [3]	Г 1373 К, 1 год. + ВП 1023 К, 16 год.; 923 К, 10 год.	870	23,0	1583	1,82	1220	1,40	1,3
6		Г 1373 К, 1 год. + ВП 1023 К, 16 год.; 923 К, 10 год. + H_2	880	10,0	1443	1,64	713	0,81	2,02
7	15Х12Н2МФАВ [4]	Г 1393 К, 1год.+ВП 953 К, 2 год.	940	62,0	1983	2,11	1580	1,68	1,25
8	03Х12Н10МТ [4]	1273 К, 1 год.; 1023 К, 2 год.+ВП 773 К, 2 год.	940	79,0	2670	2,84	1740	1,85	1,53
9	03Х12Н10МТ [4]	Г 1373 К, 15 хв.; 1023 К, 2 год. + ВП 773 К, 2 год.	930	76,0	2325	2,50	1655	1,78	1,40
10	СШ Х75 [2]	ПД-АНЗО, 1 шар	430	67,5	1360	3,16	2830	1,92	1,64
11		ПД-АНЗО, 2 шара	361	60,7	1444	3,17	700	1,94	1,63
12		ПД-АНЗО, 3 шара	404	51,9	1252	3,10	776	1,92	1,61
13	СШ 12ХН2МДФ [2]	КФ 48-АНК-54, ВП = 0,0	622	59,9	1244	2,00	970	1,56	1,28
14		те ж, ВП = 0,001	623	55,6	1160	1,86	890	1,43	1,30
15		те ж, ВП = 0,0022	628	68,1	1281	2,04	1005	1,60	1,27
16		те ж, ВП = 0,004	642	67,9	1400	2,18	1117	1,74	1,25
17	20Х [5]	ВП 473 К	1150	53,9	1932	1,68	1276	1,11	1,51
18	50Х [5]	Г 1113 К + ВП 423 К, 2 год.	1860	16,5	3050	1,64	930	1,50	1,09
19		Г 1113 К + ВП 473 К, 2 год.	1920	46,7	3150	1,64	1152	0,60	2,73
20		Г 1113 К + ВП 673 К, 2 год.	1560	48,6	2530	1,64	1248	0,80	2,05
21		Г 1113 К + ВП 773 К, 2 год.	1200	57,2	1980	1,65	1080	0,90	1,83
22	40С2Х [5]	ВТМО + ВП 473 К	1760	53,0	2870	1,63	774	0,44	3,70
23		ВТМО + ВП 573 К	1690	55,0	2770	1,65	900	0,53	3,11
24	60С2Х [5]	ВТМО + ВП 573 К	2205	38,0	3594	1,63	433	0,21	7,76
25		ВТМО + ВП 773 К	1570	40,0	2575	1,64	723	0,46	3,56
26	ШХ15 [5]	З 1133 К + ВП 473 К	2120	3,6	3460	1,63	1502	0,07	23,2
27	24ХН0МФА [5]	Г 1153 К + ВП 913 К, 15 год.	765	73,5	1920	2,51	1362	1,78	1,41
28	65Ф [5]	стан поставки	700	28,0	1183	1,69	800	1,14	1,48
29	10ХСНД [6]	вздовж прокату	419	69,7	1223	2,92	1020	2,43	1,20
30	10ХСНД [6]	поперек прокату	445	73,7	1400	3,15	1175	2,64	1,19
31	12Г2МФТ [6]	вздовж прокату	571	65,6	1290	2,26	1050	1,84	1,22
32		поперек прокату	602	58,4	1282	2,03	975	1,62	1,25
33	15ХСНД [7]	стан поставки	328	68,0	1046	3,19	880	2,68	1,19

Примітки: Г — гартування; ПО — пічне охолодження; ВП — відпуск; H_2 — водневе середовище; ЗШ — зварний шов; ПД — порошковий дріт; КФ — керамічний флюс; В — вміст Бору; ВТМО — високотемпературне термічне оброблення, $B_{rCO} = \sigma_{CO}/\sigma_{0,2}$. Цифри посилань в колонці КС наведено в роботі [11].

показники B_r за експериментальними даними цитованих джерел, вказаних у колонці КС (табл. 1) в [11].

Нами в таблицю додано колонку α_{ef}, вирахувану з величин S_K і σ_{CO} за формулою (2).

Рисунок 4 підтверджує висновок про сповільнений характер зміни параметрів B_r і α_{ef} у порівнянні з «температурним» способом зміцнення криць (рис. 3), а також показує, що на зразках зі стандартною тріщиною втрата стабільности міцности σ_{CO} неминуча для високоміцних криць навіть найвищої конструкційної якости типу АК-35 вже за кімнатних температур (див. точку перетину кривих B_r і α_{ef} при $\sigma_{0,2} \cong 1200$ МПа; рис. 3).

Можна помітити відмінність у характері зміни ефективности руйнувальної дії КН (α_{ef}) з наближенням до критичного значення α_{efc} чи B_{rc} на двох рисунках — за «структурного» способу зміцнення (рис. 4) параметер α_{ef} наближається до критичного α_{efc} дуже повільно та лише в закритичній (крихкій) області нестабільної міцности починає стрімко зростати. За «температурного» способу зміцнення криць (рис. 3) це зростання ЕКН (α_{ef}) починається ще на докритичній стадії стабільности міцности тіла з КН (σ_{NF}; $\sigma_{CO} > \sigma_{0,2}$). Завдяки цьому охолодження криці істотно пришвидшує критичний стан крихкости металу ($\alpha_{efc} = B_{rc}$) (рис. 3). Саме тому у практичному матеріялознавстві набули поширення такі методи атестації стопів на їхню крихкість, як руйнування зразків з концентраторами за понижених температур з визначенням критичної температури крихко-в'язкого переходу T_C [13].

Температурний вимір критичного стану (T_C) зручний своєю простотою та наочністю, але позбавлений прив'язки до механічних властивостей, а отже, для кожного конкретного стопу показник T_C має суто індивідуальну величину, яку важко порівнювати з іншим стопом.

Тому критерії крихкости стопів, прив'язані до критичних показників механічних властивостей, таких як міцність (3) або резерв міцности (4), є завідомо більш універсальними й інформативними. Зокрема, можна ставити задачу дослідити вплив міцности $\sigma_{0,2}$ або зламостійкости B_r на закономірність зміни показника окрихчувальної дії КН α_{ef}. Це — задача фундаментального рівня, яку неможливо здійснити стосовно показника критичної температури T_C, оскільки T_C є чутливою не лише до рівня міцности стопу $\sigma_{0,2}$, а й до нелінійности температурної залежности міцности $\sigma_{0,2}(T)$.

3. ВПЛИВ МІЦНОСТИ НА КРИТИЧНІ ПАРАМЕТРИ КРИХКОСТИ МЕТАЛЕВИХ СТОПІВ

Критерій крихкости (4) металів у вигляді безрозмірних параметрів РСМ (B_r) і ЕКН (α_{ef}) можна вважати найбільш універсальним, оскільки він містить в собі як температурний критерій $T = T_C$ (рис. 1 і 2), так і критерій критичної зламостійкости $B_r = B_{rc}$ (рис. 2 і 3) чи то

критичної міцности $\sigma_{0,2} = \sigma_{0,2C}$ (рис. 3), які по суті є окремим видом більш загального критерію $B_r = \alpha_{ef}$. Кожен з окремих критеріїв відображає свою власну ознаку втрати механічної стабільности (тобто крихкости криці) — температуру (T_C), критичний резерв міцности (B_{rc}) або критичну міцність стопу з даним видом неоднорідности поля напружень, і ці ознаки не обов'язково можуть узгоджуватися одна з іншою. Наприклад, на рис. 2 видно, що за температурною ознакою крихкости T_C на зразках з тріщиною кращим матеріялом є α-Fe ($T_C \cong 140$ К), найгіршим — високоякісна криця АК-35 ($T_C \cong 180$ К). Але за критерієм критичної зламостійкости $B_{rc} = \alpha_{ef}$, навпаки, криця АК-35 є найкращою ($\alpha_{efc} = 1,9$), а α-Fe має показник $\alpha_{efc} \cong 2,7$. Нагадаємо, що за визначенням (2) α_{ef} є показником окрихчувальної ефективности КН, тобто наскільки сильно КН понижує напруження руйнування σ_{NF} відносно граничної міцности металу S_K: $\alpha_{ef} = S_K/\sigma_{NF}$. Отже, чим нижче показник α_{ef}, тим менше неоднорідність поля «псує» граничну міцність металу і тим менше проявляє себе окрихчувальна дія КН. Тобто завжди бажано мати найнижче значення α_{ef}. За рисунком 2 такими є криці АК-35 і 10ХСНД, а за табл. 1 — криці відповідно до п.п. 1, 5, 7, 23, 30, 33.

Отже, атестація стопів щодо їхньої схильности до окрихчення від дії КН за ознакою T_C не завжди відображає конструкційну якість

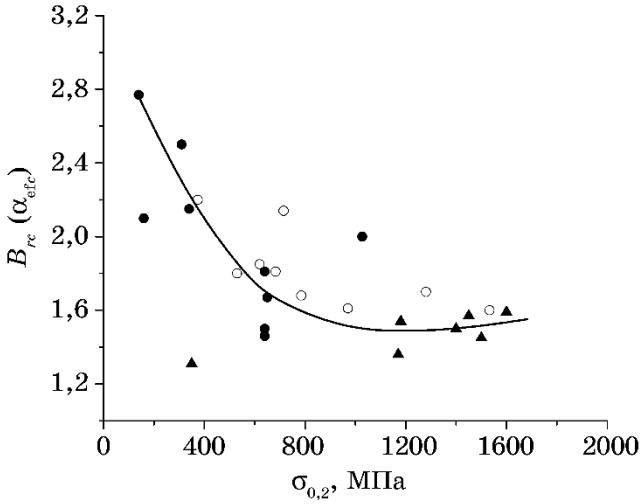


Рис. 5. Залежність критичних параметрів B_{rc} (α_{efc}) для T_C від міцности криць $\sigma_{0,2}$ на зразках з різними видами КН: ● — тріщина втоми (за [10]), ○ — кільцевий надріз за [11], ▲ — за [15].

Fig. 5. Dependences of the critical parameter B_{rc} (α_{efc}) at T_C on yield strength $\sigma_{0.2}$ for specimens with various SR types: ●—fatigue crack (by [10]), ○—circular notch (by [11]), ▲—by [15].

або конструкційну придатність стопу для надійного несення розрахункових силових навантажень. Практична корисність параметра T_C до певної міри може виявитися в тих випадках, коли T_C знаходиться безпосередньо в зоні кліматичних ($T_к$) або експлуатаційних ($T_{експ}$) температур, де загроза втрати експлуатаційної придатности стопу стає очевидною.

В цьому відношенні більш інформативними маркерами в'язко-крихкого переходу можуть стати критичні показники, що представляють певні механічні властивости стопу в умовах дії КН безпосередньо за температури T_C: $\sigma_{0,2C}$, B_{rc} (α_{efc}). Можливості практичного застосування цих механічних показників в атестації конструкційної придатности металевих стопів потребують окремого розгляду, а тут ми торкнемося лише впливу міцности $\sigma_{0,2}$ і зламостійкости B_r на критичні показники B_{rc} (α_{efc}).

Окремі питання впливу резерву міцности B_r на параметри крихкого стану T_C і B_{rc} раніше розглядалися в нашій роботі [14] із залученням даних з довідника [15]. Результати роботи [14] дають змогу відобразити залежність від міцности $\sigma_{0,2}$ критичного параметра α_{efc} (B_{rc}) (рис. 5). Цілком логічно, що критичні значення B_{rc} так само понижуються з підвищенням $\sigma_{0,2}$, як і B_r і α_{ef} на рис. 4, але розкид показників B_{rc} значно більший, аніж для B_r, що, безумовно, пов'язане з впливом пластичности (точніше, зламостійкости B_r) на B_{rc} і, відповідно, на критичний показник ЕКН α_{efc}.

4. ЗАКОНОМІРНОСТИ ВПЛИВУ РЕЗЕРВУ МІЦНОСТИ (ЗЛАМОСТІЙКОСТИ) B_r НА РУЙНУВАЛЬНУ ЕФЕКТИВНІСТЬ КН α_{ef}

Пластичність є другою найважливішою механічною властивістю металевих стопів, яка цілком зосереджена в резерві міцности B_r за (1); тому будь-яку продуктивну аналізу ролі пластичности в механічній поведінці металевих тіл доводиться виконувати в параметрах узагальненої характеристики пластичности — зламостійкости B_r [1–5, 11–14].

На рисунку 6 залежності параметра α_{ef} від міцности $\sigma_{0,2}$, що були представлені на рис. 3 і 4, перебудовано в координатах «α_{ef}–B_r». Помітно, що характер кривих зміни α_{ef} для «температурного» способу зміцнення принципово не змінився (порівняти криві *1а*, *2а* і *3а* рисунків 3 і 6), тоді як для «структурного» способу зміцнення крива *2* на рис. 6 втратила той розбіг показників α_{ef}, що був на її залежності від показника міцности $\sigma_{0,2}$ (рис. 4). Це означає, що саме резерв міцности B_r, а не сама міцність $\sigma_{0,2}$ визначає ефективність руйнувальної дії КН α_{ef}. Впорядкований вигляд кривих *1а–3а* на рис. 3 лише підтверджує цей висновок.

Цілком зрозуміло, якщо в залежностях від резерву міцности

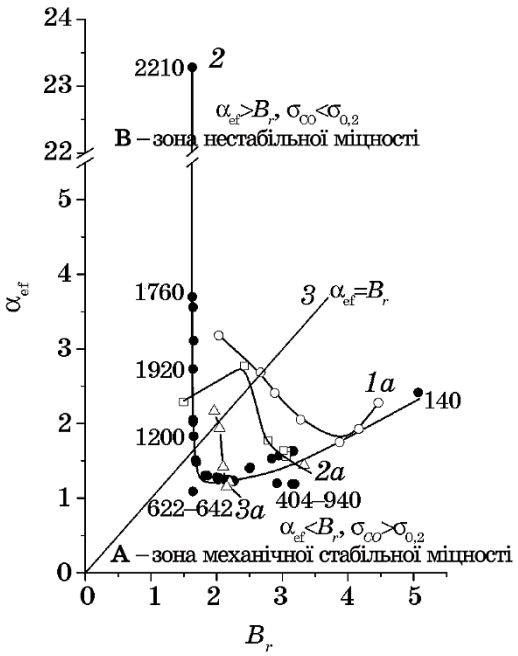


Рис. 6. Залежність коефіцієнта ЕКН α_{ef} від резерву міцности B_r. Криві *1а*, *2а*, *3а* — за «температурного» способу зміцнення криць α-Fe, 10ХСНД і АК-35 відповідно (за [10]). *2* — структурний вплив на міцність $\sigma_{0,2}$ за $T_к = 300$ К за рахунок складу криці та термооброблення (за [11]). Цифри біля кривих — позначки рівня міцности $\sigma_{0,2}$ (табл., крива *3*; рис. *2*, криві *1а–3а*). *3* — лінія критичного переходу від стабільної **(А)** до нестабільної **(В)** міцности зразків з тріщиною втоми.

Fig. 6. Dependence of coefficient α_{ef} on the strength margin B_r. Curves *1a*, *2a*, *3a*—at the 'temperature' method of hardening for α-Fe, 10ХСНД and АК-35, respectively (by [10]). *2* shows the structural influence on yield strength $\sigma_{0.2}$ at $T_к = 300$ К due to the steel composition and heat treatment (by [11]). The numbers next to the curves are the strength level $\sigma_{0.2}$ marks (Table, curve *3*; Fig. *2*, curves *1a–3a*). *3* is the critical transition line from stable to unstable strength of specimens with fatigue crack.

впорядковуються параметри α_{ef} для криць різного класу міцности, то й критичні показники α_{efc}, що на рис. 5, мають теж втратити свій розбіг, що було показано в [1].

Таким чином, аналіза експериментальних даних вказує на те, що з двох головних механічних властивостей металу, — міцности та пластичности, — роль чинника, що реґулює ефективність окрихчувальної дії КН α_{ef}, належить резерву міцности B_r, тобто показнику пластичности, але не в простому деформаційному вимірі (δ_p, ψ_K), а в узагальненій формі у вигляді властивости зламостійкости (B_r за

(1)).

На рисунку 6 діягональна пряма *3* для умови $\alpha_{ef} = B_r$ ділить простір рисунку на дві протилежні зони: в зоні **B** розміщені позначки $\alpha_{ef} > B_r$ означають, що відповідні рівні міцности криць $\sigma_{0,2}$ не можуть бути у зразку з КН, тому що номінальне напруження руйнування зразка $\sigma_{CO} < \sigma_{0,2}$. В рамках концепції механічної стабільности міцности це означає нестабільність міцности руйнування σ_{CO}.

В оглядовій роботі Дж. Нотта [16] такий стан кваліфікується як катастрофічне «швидке» руйнування, що свідчить про непридатність криці для конструкції даного типу. Навпаки, в зоні **A** ($\alpha_{ef} < B_r$, $\sigma_{CO} > \sigma_{0,2}$) розташована зона стабільної міцности σ_{CO}, яка відповідно до [16] означає реґулярний вид «пластичного» руйнування виробу внаслідок екстремально надлишкового перевантаження тіла.

Власне, поділ на вказані два види типів руйнування металевих об'єктів є технічно виправданим і більш зрозумілим, аніж поділ на крихкі та в'язкі види руйнування. Концепція механічної стабільности міцности, викладена вище, надає такому поділу видів руйнування (за автором [16]) певного фізичного змісту. Більше того, в цій концепції закладено можливість запровадити систему відліку міри конструкційної придатности металевого стопу у вигляді кількісного показника конструкційної придатности (ПКП) стопу для виробів певного класу відповідальности за силову надійність елементу конструкції. Але ця тема потребує окремого розгляду.

В Ч. 3 циклу робіт з концепції механічної стабільности металів буде розглянуто роль чинників НДС у окрихченні під дією КН.

5. ВИСНОВКИ

1. Руйнувальна ефективність КН визначається параметром α_{ef}, дія якого проявляється через фактори деформаційного (B_r) і пружнього (j) перенапруження в зоні пластичного деформування біля кінчика КН. Величина α_{ef} є мірою співвідношення істинних напружень руйнувань гладкого зразка (S_K) і зразка з КН (σ_{NF}): $\alpha_{ef} = S_K/\sigma_{NF}$.
2. Захист металу від крихкости здійснюється за рахунок резерву міцности $B_r = S_K/\sigma_{0,2}$, в межах якого реалізуються фактори перенапруження — деформаційного (B_r) і пружнього (j), що проявляється у величині параметра α_{ef}. Критичний в'язко-крихкий перехід під дією КН визначається критерієм $\alpha_{ef} = B_r$, причому самі параметри набувають критичного значення $\alpha_{ef} = B_{rc}$.
3. Кожен з параметрів механічної стабільности має власну залежність від механічних властивостей — міцности та пластичности (зламостійкости). Зламостійкість B_r з підвищенням міцности $\sigma_{0,2}$ спадає, а α_{ef}, навпаки, зростає, особливо виразно для високоміцних криць ($\sigma_{0,2} > 1000$ МПа) з низькою зламостійкістю ($B_r < 1,6–1,7$).
4. Критичні значення параметрів B_{rc} і α_{efc} мають подібну, але наба-

гато слабшу залежність від міцности. Для високоміцних криць критичні значення α_{efc} і B_{rc} тотожні наявним показникам зламостійкости $B_r \leq 1{,}6$–$1{,}7$ і мало придатні для оцінювання конструкційної придатности криць за наявности КН.

5. Невиразна залежність критичних значень B_{rc} і α_{efc} від механічних властивостей $\sigma_{0,2}$ і B_r означає, що критичні показники взагалі втрачають свою практичну вагомість для системи атестації криць на крихкість у порівнянні з більш виразними наявними показниками B_r і α_{ef} безпосередньо за температур експлуатації виробів $T_{експ}$. Саме цей комплекс механічних характеристик утворює відповідний показник конструкційної придатности криць, який потребує окремого розгляду (див. «Ч. 3»).

Фінансування. Роботу виконано за фінансової підтримки НАН України (реєстраційний номер теми 0121U107569).

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Ю. Я. Мєшков, Г. П. Зіміна, *Металофіз. новітні технол.*, **45**, № 8: 1029 (2023).
2. В. Н. Грищенко, Ю. Я. Мешков, Ю. А. Полушкин, А. В. Шиян, *Металлофиз. новейшие технол.*, **37**, № 7: 961 (2015).
3. Ю. Я. Мешков, А. В. Шиян, *Сталь*, № 4: 46 (2018).
4. Ю. Я. Мешков, А. В. Шиян, *Сталь*, № 12: 52 (2019).
5. А. В. Шиян, Ю. Я. Мешков, *Металлофиз. новейшие технол.*, **41**, № 6: 775 (2019).
6. Р. Петерсон, *Коэффициенты концентрации напряжений* (Москва: Мир: 1977).
7. Г. Н. Савин, В. И. Тульчин, *Справочник по концентрации напряжений* (Киев: Вища школа: 1976).
8. Ю. Я. Мешков, Г. А. Пахаренко, *Структура металла и хрупкость стальных изделий* (Киев: Наукова думка: 1985).
9. Ю. Я. Мешков., С. А. Котречко, А. В. Шиян, *Механическая стабильность металлов и сплавов* (Киев: Наукова думка: 2014).
10. А. В. Шиян, *Физическая природа локального напряжения хрупкого разрушения сталей и сварных швов: автореф. дис. ... канд. физ.-мат. наук* (Киев: Институт металлофизики АН УССР: 1990).
11. А. В. Шиян, Ю. Я. Мешков, Ю. А. Полушкин, *Сталь*, № 6: 39 (2019).
12. *Расчеты и испытания на прочность. Методы механических испытаний металлов. Определение характеристик трещиностойкости (вязкости разрушения) при статическом нагружении. ГОСТ 25.506-85* (Москва: Изд-во стандартов: 1985).
13. *Металлы. Метод испытания на ударный изгиб при пониженных, комнатной и повышенных температурах. ГОСТ 9454-78* (Москва: Изд-во стандартов: 1978).
14. Ю. Я. Мєшков, Г. П. Зіміна, *Металофіз. новітні технол.*, **44**, № 6: 807 (2022).
15. П. Ф. Кошелев, С. Е. Беляев, *Прочность и пластичность конструкцион-*

ных материалов при низких температурах (Москва: Машиностроение: 1967).
16. J. Knott, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **373**: 20140126.

REFERENCES

1. Yu. Ya. Meshkov and G. P. Zimina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 8: 1029 (in Ukrainian).
2. V. N. Gryshchenko, Yu. Ya. Meshkov, Yu. A. Polushkin, and A. V. Shiyan, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **37**, No. 7: 961 (2015) (in Russian).
3. Yu. Ya. Meshkov and A. V. Shiyan, *Stal'*, No. 4: 46 (2018) (in Russian).
4. Yu. Ya. Meshkov and A. V. Shiyan, *Stal'*, No. 12: 52 (2019) (in Russian).
5. A. V. Shiyan and Yu. Ya. Meshkov, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **41**, No. 6: 775 (2019) (in Russian).
6. R. Peterson, *Koehffitsienty Kontsentratsii Napryazheniy* [Stress Concentra-tion Factors] (Moskva: Mir: 1977) (in Russian).
7. G. N. Savin and V. I. Tul'chin, *Spravochnik po Kontsentratsii Napryazheniy* [Handbook of Stress Concentration] (Kiev: Vyshcha Shkola: 1976) (in Russian).
8. Yu. Ya. Meshkov and G. A. Pakharenko, *Struktura Metalla i Khrupkost' Stal'nykh Izdeliy* [Metal Structure and Brittleness of Steel Products] (Kiev: Naukova Dumka: 1985) (in Russian).
9. Yu. Ya. Meshkov, S. A. Kotrechko, and A. V. Shiyan, *Mekhanicheskaya Stabil'nost' Metallov i Splavov* [Mechanical Stability of Metals and Alloys] (Kiev: Naukova Dumka: 2014) (in Russian).
10. A. V. Shiyan, *Fizicheskaya Priroda Lokalnogo Napryazheniya Khrupkogo Razrusheniya Staley i Svarnykh Shvov* [The Physical Nature of the Local Stress of Brittle Fracture of Steels and Welds] (Thesis of Disser. for Cand. Phys.-Math. Sci.) (Kiev: Institute for Metal Physics, Academy of Sciences of Ukr.SSR: 1990) (in Russian).
11. A. V. Shiyan, Yu. Ya. Meshkov, and Yu. A. Polushkin, *Stal'*, No. 6: 39 (2019)(in Russian).
12. *Rashchyoty i Ispytaniya na Prochnost'. Metody Mekhanicheskikh Ispytaniy Metallov. Opredelenie Kharakteristik Treshchinostoykosti (Viazkosti Razrusheniya) pri Staticheskom Nagruzhenii. GOST 25.506-85* (Moskva: Izdatel'stvo Standartov: 1985) (in Russian).
13. *Metally. Metody Ispytaniya na Udarnyi Izgib pri Ponizhennykh, Komnatnoy i Povyshennykh Temperatyrakh* [Metals. Impact Test Method at Low, Room, and High Temperatures], *GOST 9454-78* (Moskva: Izdatel'stvo Standartov: 1978)(in Russian).
14. Yu. Ya. Meshkov and G. P. Zimina, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **44**, No. 6: 807 (2022) (in Ukrainian).
15. P. F. Koshelev and S. E. Belyaev, *Prochnost' i Plastichnost'Konstruktsionnykh Materialov pri Nizkikh Temperaturakh* [Strength and Plasticity of Structural Materials at Low Temperatures] (Moskva: Metallurgiya: 1967) (in Russian).
16. J. Knott, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **373**: 20140126.

Metallophysics and Advanced Technologies
Металофіз. новітні технол.
Metallofiz. Noveishie Tekhnol.
2024, vol. 46, No. 4, pp. 371–383
https://doi.org/10.15407/mfint.46.04.0371
Reprints available directly from the publisher

© 2024 G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics,
National Academy of Sciences of Ukraine
Published by license under
the G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics–
N.A.S. of Ukraine Publishers imprint.
Printed in Ukraine.

PACS numbers: 68.47.Gh, 81.05.Ni, 81.40.Np, 81.65.Kn, 82.45.Bb, 88.30.Nn

The Influence of the Components of the 06ХН28МДТ Alloy (Analogue of AISI904L Steel) and the Parameters of the Model Chloride-Containing Recycled Water of Enterprises on Its Pitting Resistance

A. V. Dzhus, O. E. Narivskyi*, S. A. Subbotin, T. V. Pulina,
G. V. Snizhnoi, and S. D. Leoshchenko

Zaporizhzhia Polytechnic National University,
64 Zhukovsky Str.,
UA-69063 Zaporizhzhya, Ukraine
**LLC 'Ukrspetsmash',*
7 Haharina Str.,
UA-71100 Berdiansk, Ukraine

Two mathematical models, which describe the dependence of critical pitting temperatures of 06ХН28МДТ alloy (analogue of AISI904L steel) in model recycled water with pH 4–8 and chloride concentration from 350 up to 600 mg/l on chemical composition and structure, are developed. They are based on multivariate regressions with pairwise combinations of features and a three-layer neural network of direct signal. Applying the developed mathematical models, it is found that the critical pitting temperatures of the 06ХН28МДТ alloy increase with an increase in the pH of model recycled water, the content of Cr, Mo, Cu, the volume of titanium nitrides within it, and a decrease in the medium austenite-grain diameter, the content of nickel within the standard, and chlorides in the media. At the same time, the analysis of the developed mathematical model, which is based on multivariate regressions with paired combinations of features (alloy and media parameters), reveals that the content of Cr and Ni in the alloy in combination with the medium austenite-grain diameter most significantly affect its pitting resistance in model recycled waters, and an effect of the Cr content in combination with

Corresponding author: Anna Vyacheslavivna Dzhus
E-mail: Anna-92@ukr.net

Citation: A. V. Dzhus, O. E. Narivskyi, S. A. Subbotin, T. V. Pulina, G. V. Snizhnoi, and S. D. Leoshchenko, The Influence of the Components of the 06ХН28МДТ Alloy (Analogue of AISI904L Steel) and the Parameters of the Model Chloride-Containing Recycled Water of Enterprises on Its Pitting Resistance, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **45**, No. 4: 371–383 (2024). DOI: 10.15407/mfint.46.04.0371

pH and chloride concentration in the media is somewhat lower, but much higher than an effect of the Mo and Cu content, and the volume of titanium nitrides in combination with the media parameters. The developed mathematical model, which is based on a three-layer neural network of direct signal propagation, is recommended for predicting the pitting resistance of heat exchangers made of 06ХН28МДТ alloy or AISI904L steel when operating in recycled water. In addition, the developed mathematical model, based on multivariate regressions with paired combinations of features (alloy and media parameters), is recommended for selecting the optimal melts of this alloy or steel, which are most resistant to pitting in recycled water.

Key words: pitting resistance, heat exchanger, recycled water, structural heterogeneity, pitting resistance prediction.

Розроблено два математичних моделі, які описують залежності критичних температур пітинґування стопу 06ХН28МДТ (аналог криці AISI904L) у модельних оборотніх водах з pH 4–8 і концентрацією хлоридів від 350 до 600 мг/л від хемічного складу та структури. Вони ґрунтуються на багатовимірних реґресіях з парними комбінаціями ознак і тришаровій нейронній мережі прямого поширення сиґналу. Із застосуванням розроблених математичних моделів встановлено, що критичні температури пітинґування стопу 06ХН28МДТ ростуть зі збільшенням pH модельних оборотніх вод, вмісту Cr, Mo, Cu, об'єму нітридів Титану в ньому та зменшенням середнього діяметра зерна аустеніту, вмісту Ніклю в межах стандарту та хлоридів у середовищі. Водночас з аналізи розробленого математичного моделю, який ґрунтується на багатовимірних реґресіях з парними комбінаціями ознак (параметрів стопу та середовища) виявлено, що вміст Cr і Ni в стопі в комбінаціях із середнім діяметром зерна аустеніту найістотніше впливають на його пітинґотривкість у модельних оборотніх водах, а вміст Cr в комбінаціях з pH і концентрацією хлоридів у середовищі — дещо менше, але набагато більше, ніж вміст Mo, Cu, й об'єм нітридів Титану в комбінаціях з параметрами середовища. Розроблений математичний модель, який ґрунтується на тришаровій нейронній мережі прямого поширення сиґналу, рекомендовано застосовувати для прогнозування пітинґотривкости теплообмінників зі стопу 06ХН28МДТ або криці AISI904L під час роботі їх у оборотніх водах. До того ж розроблений математичний модель, який ґрунтується на багатовимірних реґресіях із парними комбінаціями ознак (параметри стопу та середовища), рекомендовано використовувати для вибору оптимальних топлень цього стопу або криці, найтривкіших до пітинґування в оборотніх водах.

Ключові слова: пітинґотривкість, теплообмінник, оборотна вода, структурна гетерогенність, прогнозування пітинґотривкости.

(Received 13 July, 2023; in final version, 25 August, 2023)

1. INTRODUCTION

Alloy 06ХН28МДТ and its analogue, stainless steel AISI904L, are used as a structural material for plate-like heat exchangers used in the

production of acids such as sulfuric, phosphoric, orthophosphoric, hydrofluoric, *etc.* [1, 2]. Water from the recycling systems of enterprises is used to cool the products of technological processes. It contains chloride ions and other anions that can cause pitting and subsequently ulcer corrosion of heat plate-like exchanger plates on the recycled water side [3, 4]. Heat transfer plates of heat plate-like exchangers with a thickness of 0.3 to 1.0 mm are subject to perforation in case of pitting corrosion within a few months, which contributes to the spoilage of technological products due to the recycled water overflow of into the process medium, equipment failure and production shutdown [5]. Therefore, assessing the pitting resistance of 06ХН28МДТ alloy and predicting its corrosion behaviour under heat exchanger operating conditions, depending on its components and parameters of recycled water, is an actual issue. The authors of [6, 7] determined the pitting resistance of this alloy by the gravimetric method according to ГОСТ 9.192-89 [8] and evaluated the effect of the chemical composition within the standard and the structure components on the rate of corrosion losses from pits. Paper [9] determined the critical pitting temperatures (CPT) of the 06ХН28МДТ alloy in model recycled waters with pH 4–8 and chloride concentrations of 350, 400, 500, 550, 600 mg/l, which are most commonly encountered in the operation of heat exchangers, and established direct regression relationships between them and the chemical elements in the alloy and its structure components. However, the gravimetric and electrochemical methods used in [6, 7] can only be used to assess the relative pitting resistance of steels and alloys, and its assessment according to [9] is discrete and does not take into account the weightiness of alloy components to pitting resistance. Therefore, we used a multivariate regression model with paired combinations of features and a model based on a three-layer neural network of direct signal to determine the influence of alloy components and the media on its pitting resistance.

2. EXPERIMENTAL/THEORETICAL DETAILS

Five industrial melts of 06ХН28МДТ alloy have been studied (see Table 1). Their CPT and structure were determined earlier [9]. A mathematical model of the dependence of the alloy's CPT on its chemical composition, structure, and recycled water parameters was built using a multivariate regression model with paired combinations of features [10], which has the following form:

$$y^{s^*} = W_0 + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i+1}^{N} W_{ij} x_i^s x_j^s, \; s = 1, 2, \ldots. \tag{1}$$

where y^s is a value of the output feature for the s-th observation of the

TABLE 1. Inclusions in 06ХН28МДТ alloy: titanium nitrides (*a*), titanium sulphides (*x*) (*b*).

Melt number			Content of alloying elements, % wt.							
	C	Si	Mn	Cr	Ni	Mo	Cu	Ti	S	P
1	0,050	0,60	0,32	24,31	27,39	2,90	2,75	0,79	0,006	0,029
2	0,067	0,57	0,46	22,68	27,65	2,78	2,68	0,59	0,005	0,027
3	0,068	0,55	0,54	21,84	27,45	2,55	2,60	0,55	0,004	0,038
4	0,048	0,62	0,57	22,67	27,73	2,56	2,53	0,67	0,006	0,028
5	0,050	0,57	0,31	23,46	27,51	2,51	2,78	0,89	0,004	0,032

sample (CPT), W_{ij} is a weight of the pair of the i-th and j-th features, x_{js} is a value of the j-th feature of the s-th sample instance.

In particular, x_1 is a pH of recycled water (4–8), x_2 is a chloride content in it (350, 400, 500, 550, 600 mg/l) [9], x_3 is a carbon (C) content in the alloy, % wt., x_4 is a manganese (Mn) content in the alloy, % wt., x_5 is a silicon (Si) content in the alloy, % wt., x_6 is a chromium (Cr) content in the alloy, % wt., x_7 is a nickel (Ni) content in the alloy, % wt., x_8 is a titanium (Ti) content in the alloy, % wt., x_9 is a sulphur (S) content in the alloy, % wt., x_{10} is a phosphorus (P) content in the alloy, % wt., x_{11} is a molybdenum (Mo) content in the alloy, % wt., x_{12} is a copper (Cu) content in the alloy, % wt. (Table 1), x_{13} is a volume of nitrides ($V_{\text{Н}}$) in the alloy (0.0931–0.1918, % vol.), x_{14} is a volume of sulphides and oxysulfides ($V_{\text{oks.}}$) in the alloy (0.0031–0.0091, % vol.), x_{15} is a d_g a medium austenite grain diameter (11–31 μm), S is a number of sample instances.

The weighting coefficients of the multivariate regression model with paired combinations of features (1) by the least squares method have been determined [10].

The model based on a three-layer neural network of direct signal propagation can be described by the formula (2) [11]:

$$y^{s^*} = \psi\left(\sum_{j=1}^{4} w_j^{(3,1)} \psi\left(\sum_{k=1}^{10} w_k^{(2,j)} \psi\left(\sum_{j=1}^{15} w_j^{(1,k)} x_j^s + w_0^{(1,k)}\right) + w_0^{(3,j)}\right) + w_0^{(3,1)}\right), \quad (2)$$

where

$$\psi(a) = 2/(1 + e^{-2a}) - 1,$$

$w_j^{(\mu,i)}$ is a weight of the j-th input of the i-th neuron of the μ-th layer of the network. The model weights determined using the Levenberg–Marquardt method [12] are shown in Table 2.

The quality of mathematical models was assessed by the sum of the

TABLE 2. Weight matrix of a neural network model.

j \ i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
0	–134.844	108.552	–23.932	–13.9014	57.153	–106.352	–74.938	23.6736	–111.449	76.796
1	–0.2869	–0.4641	–1.3294	2370457	0.0684	0.3266	–0.5051	–1.1427	0.2523	–0.0827
2	–0.0239	0.0253	0.0262	–0.0060	0.1228	–0.0091	0.0168	0.0454	–0.0095	–0.0804
3	58.2442	46.4517	51.267712.0072		36.0747	–24.4834	–33.826	–30.0899	17.0394	46.4768
4	–2.4224	–0.0100	10644090.4055		218585	–2.6729	12.07177.1508		0.0222	–0.2617
5	–0.1886	–1.0166	4.0705	–6.4423	–1.50013.0751		–11.763	–5.9121	–1.5285	1402930
6	2167382	–2.4512	759372	–5.4321	2845242	–1.4168	1241097825116		485895	0.2011
7	62125	–2.4736	–2.4522733133		–6.5408138915		972309	–3.3467	–0.5239	–3.1939
8	570876	–4.2885	–4.14122.0000		–3.7966	–3.0473	–3.8027	–3.3315	3.1598	4.1664
9	–459.851	–462.602	316.348	–198.8480	586.166679.8659		175.503575.3475		–200.507	185.858
10	327.193552.3413		338.974175.9256		–9.7548100.0848		236.977	–240.566	–106.864	346.676
11	–0.3777	1559254	23301576.0926		–0.1759	–1.8654	–4.37870.6532		–0.1543	1971641
12	1298105	2482952	–0.0359	–1.8416	16929320.7505		–8.63070.3678		–2.3054	–5.6363
13	2850232	–3.8677	–9.0446	–13.2948	91344	–6.9190	16.390	–7.3614	–4.3400	–6.2279
14	186.381	–35.4955	145.53559.9204		127.799	–202.043	213.158202.8595		–333.690	–17.314
15	0.2702	–0.4688	–0.2367	–0.4299	–0.0938	–0.0190	–0.06720.0453		0.8374	–0.0112
0	3.3239	–5.2951	–0.0394	3.5318	0,5468					
1	–6.5506	–1.9151	1.5532	–29.4449	–0.0634					
2	–3.4062	3.3580	1.0473	–18.0075	–0.0534					
3	–6.9230	13.5103	1.0144	–0.1335	–0.0775					
4	–2.3828	1.6407	–0.5092	–0.5864	–0.0884					
5	–3.0619	–3.9370	1.4130	–25.2640						
6	3.0371	5.2854	–0.0313							
7	0.8588	1.5984	0.7082							
8	–2.0264	2.8548	–0.4572							
9	–4.7197	–3.7546	0.5146							
10	–1.6440	6.1952	–0.2568	–1.3983						

squares of instantaneous errors [10]:

$$E = \sum_{s=1}^{S} (y^s - y^{s^*})^2 , \tag{3}$$

where y^{s^*} is a model-estimated value of the output feature for the s-th

observation, y^s is an experimental value of the test sample of five melts of 06ХН28МДТ alloy.

3. RESULTS AND DISCUSSION

The analysis of the developed multivariate regression model with pairwise combinations of features (3) showed that the characteristics of model recycled water pH (x_1) and the concentration of chlorides (x_2) in it have the most significant effect on the CPT of 06ХН28МДТ alloy, *i.e.*, its resistance to pitting corrosion:

$$\begin{aligned} Y(\text{CTP}) = &-0.0028279x_1x_2 + 0.44975x_1x_6 - 0.12969x_1x_7 - \\ &-1.5328x_1x_{11} + 4.2954x_1x_{13} - 0.01219x_1x_{15} + 0.0080727x_2x_6 - \\ &-0.0023078x_2x_7 - 0.060578x_2x_{11} + 0.25833x_2x_{13} - \\ &-0.00076892x_2x_{15} - 0.47974x_6x_7 + 0.67333x_6x_{15} + \\ &+1.1452x_7x_{11} + 3.259x_7x_{12} - 0.5105x_7x_{15}. \end{aligned} \quad (4)$$

This is consistent with the results of the mathematical developed analysis models for AISI304 [13], AISI321 [14] and AISI304, AISI321, 08Х18Н10, 12Х18Н10Т together, which establish the relationship between their CPT, chemical composition, structure heterogeneity and parameters of the recycled water in which the study was conducted. In addition, it should be noted that papers [13–15] found an intensive increase in the CPT of these steels with an increase in the pH of model recycled water from 4 up to 8 and a decrease in the concentration of chlorides from 600 mg/l up to 350 mg/l. The same trend for 06ХН28МДТ alloy under similar test conditions has been found [16]. This is also consistent with well-known literature data [17–23]. The analysis of model (4) shows that the sum of the input features x_1 x_2 has a negative value of –0.0028279, which indicates a more intense effect of increasing the chloride concentration in the model recycled water from 350 mg/l up to 600 mg/l on reducing the alloys' CPT than a decrease in the pH of the medium from 8 up to 4. However, the priority effect of the chloride concentration in the model recycled water on the CPT of the 06ХН28МДТ alloy is not much more significant than its pH, since it decreases only by 9.6°C with an increase in pH (x_1) from 4 up to 8, and C_{Cl} (x_2) from 350 mg/l up to 600 mg/l.

According to the sum of the input features pH (x_1) and Cr (x_6) (see (3)), the CPT of 06ХН28МДТ alloy increases by 48.1°C with an increase in the pH (x_1) of the model recycled water from 4 up to 8 and the Cr content (x_6) in the alloy from 21.82 up to 24.29% wt.

This is due to the fact that Cr promotes the formation of dense oxide films on the surface of steels and alloys. Their resistance to pitting

corrosion depends on their properties [24]. In particular, when determining the characteristics of passive films by the pitting potential of steel, which depends on temperature, pH, chloride concentration, etc. [25], it was found that stainless steels with passive films with a closer donor bond are more prone to pitting corrosion in chloride-containing media [26].

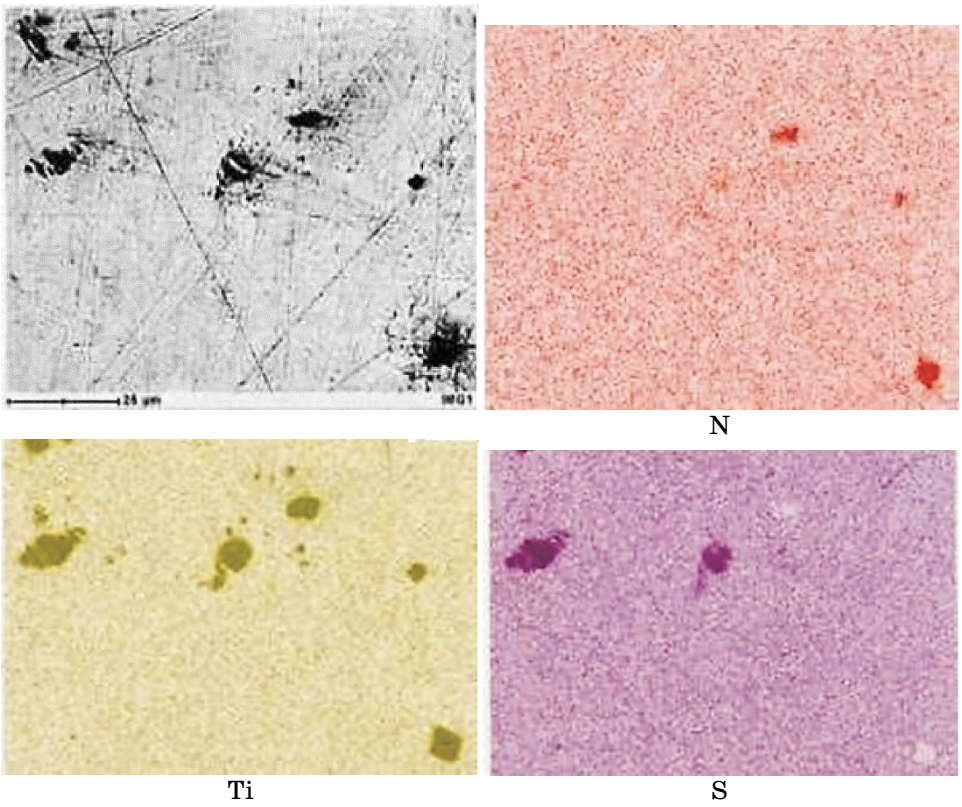
It should be noted that the pitting potential of 06ХН28МДТ alloy, which characterizes the passive film on its surface under such test conditions, equally depends on the Cr content (x_6) and pH (x_1) of model recycled water and the concentration of chlorides C_{Cl} (x_2) in it, since its CPT, as mentioned above, increases by 48.1°C with an increase in pH from 4 up to 8 and Cr content from 21.82 up to 24.29% wt. according to the sum pH (x_1)Cr (x_6) (see (4)) and by 56°C with an increase in Cr content in the same range and a decrease in chloride concentration (x_2) in model recycled water from 600 up to 350 mg/l according to the sum x_2x_6 (see (4)).

Summarizing the above, it can be noted that lowering the pH of model recycled water contributes to the formation of chromium-containing oxide films on the surface of the 06ХН28МДТ alloy with a closer donor bond than the concentration of chlorides in them. At the same time, according to paper [25] and the dependencies established above, it is obvious that the lower the chromium content in the alloy, the closer the donor properties of the oxide film as a semiconductor on its surface and the lower its pitting resistance.

Most likely, Ni and especially Mo in the alloy contribute to the formation of oxide films mixed with chromium on its surface with closer donor bonds. Since, according to the analysis of model (4), it was found that its CPT decreases by 14.5° for the sum x_1 (pH)x_7 (Ni) and 19.8° for x_1 (pH)x_{11} (Mo) with increasing media pH from 4 up to 8, Ni content from 27.4 up to 27.7% wt. and Mo from 2.53 up to 2.88% wt., respectively. A similar trend was revealed from the analysis of the mathematical model (3) for pairs of sums x_2 (Cu)x_7 (Ni) and x_2 (C_{Cl})x_{11} (Mo), since the CPT of the 06ХН28МДТ alloy decreases by 16.2 and 51°C, respectively, with an increase in the Ni content from 27.4 up to 27.7% wt., Mo from 2.53 up to 2.88% wt. and chloride concentration in the media from 350 up to 600 mg/l. It should be noted that in the case of both Cr and Ni and Mo sum, the effect of chloride concentration in the media on the CPT of the alloy is greater than its pH (x_1). This indicates that adsorption processes on the alloy surface are of priority importance in relation to its pitting corrosion. This may indicate that the dependences established according to (4) for Ni and Mo pairs are related to the porosity of oxide films, which is affected by the content of these chemical elements. It is known [27] that an increase in the porosity of oxide films on the surface of steels and alloys contributes to a decrease in their pitting resistance in chloride-containing media.

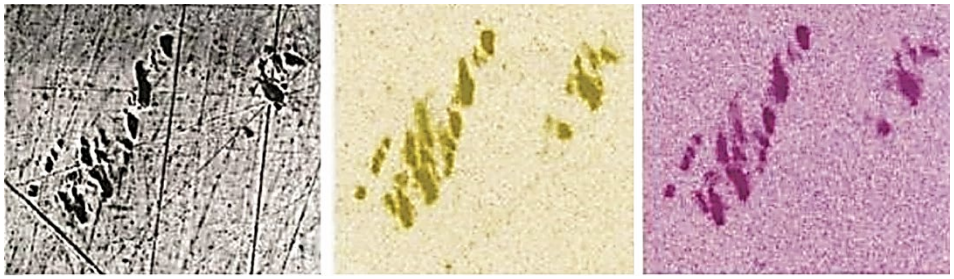
To summarize the above, it should be noted that the pH (x_1) and chloride concentration (x_2) in the media and the content of Cr, Ni and Mo in the alloy significantly affect its pitting resistance. In particular, the concentration of chlorides in the media most significantly determines the semiconductor properties of Cr, Ni and Mo-containing oxide films on the alloy surface and their resistance to pitting.

From the analysis of the mathematical model (4), it was found that the CPT of the 06ХН28МДТ alloy increases by 4.7°C with an increase in the volume of titanium nitrides (see Fig. 1) from 0.0931 up to 0.1918% vol. and the pH of the model recycled water from 4 up to 8. At the same time, it increases by 20.3°C with an increase in the volume of titanium nitride in the same interval and a chloride concentration from 350 up to 600 mg/l. This tendency may indicate that the formation of pitting in the vicinity of titanium nitride inclusions is caused by adsorption processes of chlorides from a chloride-containing media in



a

Fig. 1. Inclusions in 06ХН28МДТ alloy: titanium nitrides (*a*), titanium sulphides (*x*) (*b*).



Ti S

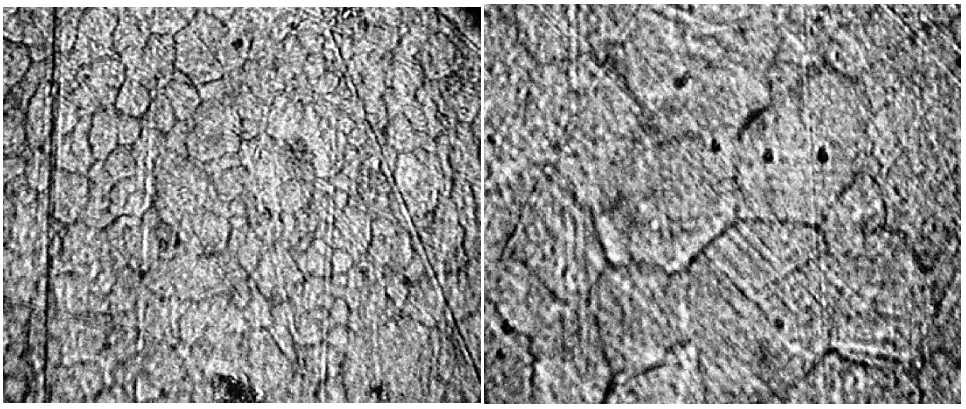
b

Continuation of Fig. 1.

places of the greatest accumulation of imperfections in the structure of oxide films on the alloy surface. Moreover, these processes depend more on the chloride concentration in the media than on its pH (x_1).

At the same time, it should be noted that works [9, 28] revealed a decrease in the CPT of AISI321 steel and 06ХН28МДТ alloy with an increase in the volume of titanium nitrides involved in pitting corrosion under similar test conditions. Thus, it follows that the more pitting sites on the surface of a steel or alloy in the vicinity of titanium nitride inclusions, the lower the resistance of the oxide film on their surface to pitting corrosion. At the same time, titanium nitrides in the 06ХН28МДТ alloy have a positive effect on the protective properties of the oxide film, which, according to paper [26], may be due to a decrease in the strength of their donor bonds.

It should also be noted that the semiconductor properties of the oxide film on the surface of the 06ХН28МДТ alloy depend much more on the content of Cr, Mo, and Ni than on the volume of titanium nitrides, which is based on a comparison of the above pairs of sums of these chemical elements and the volume of titanium nitrides with the parameters of model recycled water pH (x_1) and (x_2) chloride concentration. The influence of the medium austenite grain diameter (see Fig. 2) of the alloy on its CPT was not as significant as the content of Cr, Ni, and Mo, since it decreases by 2.5°C for the sum x_1 (pH)x_{15} (d_g) with an increase in the pH parameter (x_1) from 4 up to 8 and the medium austenite grain diameter (x_{15}) from 11 up to 31 μm. At the same time, for the pair of the sum x_2 (C_{Cl})x_{15} (d_g), a decrease in the CPT of the alloy by 11.3°C was found with an increase in its parameter x_{15} (d_g) from 11 up to 31 μm and a chloride concentration in the model recycled water from 350 up to 600 mg/l. It should be noted that the influence of the latter, as well as in pairs of sums of the media parameter x_2 (C_{Cl}) with the alloy parameters Cr (x_6), Mo (x_{11}), Ni (x_7), is significantly higher than the pH (x_1) of the media with these alloy parameters.



a *b*

Fig. 2. Austenite grain in 06ХН28МДТ alloy (×450): minimum, $d_g = 11$ μm (*a*) and maximum, $d_g = 31$ μm (*b*) meaning of medium austenite grain diameter.

The decrease in the CPT of 06ХН28МДТ alloy with an increase in the medium diameter of the austenite grain x_{15} (d_g) is most likely due to an increase in the degree of incoherence between the atoms of adjacent austenite grain lattices and, accordingly, an increase in the number of imperfections in the austenite structure at the intersection of inclusions with the boundaries of austenite grains, where stable pitting occurs and develops [29, 30]. However, this is not the main factor that determines the resistance of the 06ХН28МДТ alloy to pitting corrosion in recycled water, since according to (4), it was found that its CPT increases at conditional 345°C for a pair of sums x_6 (Cr)x_{15} (d_g) with an increase in the parameter x_{15} (d_g) from 11 up to 31 μm and the Cr content in the alloy from 21.82 up to 24.29% wt.

In addition, according to (3), the CPT of the alloy decreases by conditional 284°C for a pair of the sum x_7 (Ni)x_{15} (d_g) with an increase in the parameter x_{15} (d_g) in the same interval and the Ni content (x_7) in the alloy from 27.4 up to 27.7% wt. Thus, it turns out that an increase in the degree of incoherence between the atoms of adjacent austenite grain lattices due to an increase in its average diameter d_g (x_{15}) contributes to a decrease in the CPT (y) and pitting resistance of the 06ХН28МДТ alloy, but this effect is offset by an increase in the Cr content (x_6) due to the formation of chromium-containing oxide films with a lower donor bond on its surface. Most likely, an increase in the Ni content in the alloy contributes to an increase in the degree of donor bonding in the oxide film on the alloy surface, which reduces its resistance to pitting corrosion. It should be noted that the negative impact of increasing the Ni (x_7) content in the alloy within the standard is quite significant, since analysis (3) shows that its CPT decreases at a

conditional 35.9°C with an increase in the Cr (x_6) and Ni (x_7) content in the intervals according to the data in Table 1. At the same time, it should be noted that the negative effect of an increase in the Ni (x_7) content within the standard on the pitting resistance of the alloy is levelled out by an increase in the Mo (x_{11}) and Cu (x_{12}) content, since the CPT for the pair of the sum Ni (x_7)Mo (x_{11}) increases by 12, and for Ni (x_7) Cu (x_{12}) by 22.5°C with an increase in the content of these chemical elements in the above intervals (Table 1).

Summarizing the above, it can be noted that in model recycled waters with pH 4–8 and chloride concentration from 350 up to 600 mg/l, the pitting resistance of 06ХН28МДТ alloy increases with an increase in their pH (x_1), Cr (x_6), Mo (x_{11}), Cu (x_{12}) content and a decrease in chloride concentration (x_2) and medium austenite grain diameter. The influence of media parameters x_1, x_2, and Cr, Ni alloy and medium austenite grain diameter is the most significant. This is consistent with the results of studies [13–16]. The developed model based on a three-layer direct signal propagation neural network (2) makes it possible to more accurately determine the pitting resistance of 06ХН28МДТ alloy depending on changes in its parameters and model recycled water (x_1, x_2), but the weighting coefficients $w_j^{(\mu,i)}$ of the neural network of model (2) do not provide useful information for analysing the effect of alloy and medium parameters on its CPT.

The minimum value of the CPT error of the 06ХН28МДТ alloy determined by means of Eq. (3) is $E_{\min} = 0.0186$°C, the maximum $E_{\max} = 5.3207$°C, the average $E_{\text{av}} = 1.381508$°C, and the accumulative value $E_{\text{sum}} = -172.68.85$°C. However, the minimum value of the alloys' CPT error determined by calculation with (2) is $E_{\min} = 0.0001$°C, $E_{\max} = 1.0261$°C, $E_{\text{av}} = 0.10192$°C, and $E_{\text{sum}} = 12.72$°C. Therefore, it is recommended to use model (2) to predict the pitting resistance of 06ХН28МДТ alloy during the operation of heat exchangers, and model (3) to select the optimal melt in terms of pitting resistance.

4. CONCLUSION

Two statistical models based on multivariate regression with pairwise combinations of features and a three-layer neural network of direct signal have been developed. They are proposed to be used to select the optimal melts of 06ХН28МДТ alloy and to predict the pitting resistance of heat exchangers made of it or its analogue, AISI904L steel, when operating in recycled water. It was found that the pitting resistance of the alloy increases with an increase in the pH of recycled water, the content of Cr, Mo, Cu, and the volume of titanium nitrides in it, and a decrease in the medium austenite grain diameter, the content of nickel within the standard and chlorides in the media. The influence of Cr and Ni content in pairs of sums with the medium austen-

ite grain diameter on the pitting resistance of the alloy is most significant, and that of chromium in pairs with the media parameters is somewhat less.

REFERENCES

1. *Tekhnicheskie Usloviya. ТУ 3.17.–00217417-024-97. Teploobmenniki Plastinchastyye Razbornyye* [Technical Specifications ТУ 3.17.–00217417-024-97. Plate-Like Heat Exchangers] (PrAT Zavod 'Pavlogradkhimmash': 1998) (in Russian).
2. G. Ya. Vorob'eva, *Korrozionnaya Stoykost' Materialov v Agressivnykh Sredakh Khimicheskikh Proizvodstv* [Corrosion Resistance of Materials in Aggressive Environments of Chemical Industries] (Moskva: Khimiya: 1985) (in Russian).
3. O. E. Narivs'kyi, *Mater. Sci.*, **41**: 122 (2005).
4. O. E. Narivs'kyi, *Mater. Sci.*, **43**: 124 (2007).
5. V. A. Kachanov and D. G. Nikitin, *Issledovanie Sklonnosti Stali 12X18H10T k Tochechno-Yazvennoy i Shchelevoy Korrozii v Neytral'nykh Sredakh Primenitel'no k Razbornym Plastinchatym Teploobmennikam* [Study of 12X18H10T Steel Susceptibility to Pitting and Crevice Corrosion in Neutral Media as Applied to Plate Like Heat Exchangers] (Kharkiv: UkrNIIhimmash: 1985) (in Russian).
6. A. Narivskiy, R. Atchibayev, A. Muradov, K. Mukashevand Y. Yar-Mukhamedov, *Int. Multidisciplinary Sci. Conf. Surveying Geology and Mining Ecology Management—SGEM*, p. 267 (2018).
7. A. Narivskiy, G. Yar-Mukhamedova, E. Temirgaliyeva, M. Mukhtarova, and Y. Yar-Mukhamedov, *Int. Multidisciplinary Sci. Conf. Surveying Geology and Mining Ecology Management—SGEM*, vol. **1**, p. 63 (2016).
8. *GOST 9.912-89. Metody Uskorennykh Ispytaniy na Stoykost' k Pittingovoy Korrozii* [ГОСТ 9.912-89. Accelerated Pitting Resistance Test Methods] (Izdatel'stvo Standartov: 1989) (in Russian).
9. O. E. Narivs'kyi and S. B. Belikov, *Mater. Sci.*, **44**: 573 (2008).
10. D. A. Frudman, *Statistical Models: Theory and Practice* (Cambridge: Cambridge University Press: 2005).
11. S. O. Haykin, *Neutral Networks and Learning Machines* (London: Pearson: 2008).
12. J. Nacedal and S. Wright, *Numeral Optimisation* (New York: Springer-Verlag: 2006).
13. O. E. Narivskyi, S. A. Subbotin, T. V. Pulina, and M. S. Khoma, *Mater. Sci.*, **58**: 41 (2022).
14. O. E. Narivskyi, S. B. Belikov, S. A. Subbotin, and T. V. Pulina, *Mater. Sci.*. **57**: 291 (2021).
15. O. Narivs'kyi, R. Atchibayev, A. Kemelzhanova, G. Yar-Mukhamedova, G. Snizhnoy, S. Subbotin, and A. Beisebayeva, *Eurasian Chem.-Tech. J.*, **24**, No. 4: 295 (2022).
16. P. C. Pistorius and G. T. Burstein, *Corrosion Sci.*, **33**, Iss. 12: 1885 (1992).
17. P. C. Pistorious and G. T. Burstein, *Corrosion Sci.*, **36**, Iss. 3: 525 (1994).
18. J.-O. Nilsson, *Mater. Sci. Technol.*, **8**, Iss. 8: 685 (1992).
19. N. Bastos, S. M. Tavares, Francis Dalard, and R. P. Nogueira, *Scripta Mater.*,

57: 913 (2007).
20. R. J. Brigham and E. W. Tozer, *Corrosion*, **29**: 33 (1973).
21. J. M. Salinas-Bravo and R. C. Newman, *Corrosion Sci.*, **36**: 67 (1994).
22. Y. Tsutsumi, A. Nishikata, and T. Tsuru, *Corrosion Sci.*, **49**: 1394 (2007).
23. P. C. Pistorious and G. T. Burstein, *Corrosion Sci.*, **36**, Iss. 3: 525 (1994).
24. L. Martinez, B. Melki, G. Berthome, B. Baroux, and F. Perez, *Surf. Coat. Technol.*, **201**, Iss. 3–4: 1671 (2006).
25. C. Alonso, M. Castellote, and C. Andrade, *Electrochem. Acta*, **47**: 3469 (2002).
26. W. S. Li and J. L. Luo, *Corrosion Sci.*, **44**: 1695 (2002).
27. J. H. Wang, C. C. Su and Z. Szklarska-Smialowska, *Corrosion*, **44**, Iss. 10: 732 (1988).
28. O. E. Narivs'kyy, *Mater. Sci.*, **43**: 256 (2007).
29. J. O. Park, S. Matsch, and H. Böhni, *J. Electrochem. Soc.*, **149**: 34 (2002).
30. U. M. Ehrnsten, J. Likonen, L. I. Carpen, and O. A. Varjonen, *Mater. Characterization*, **36**, Iss. 4–5: 279 (1996).

Засновник: НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ, ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ ІМ. Г. В. КУРДЮМОВА НАН УКРАЇНИ
Видавець: ВД «Академперіодика» НАН України
Передплатний індекс/Subscription index: 74312 ISSN 1024-1809

Інформація для передплатників журналу
«МЕТАЛОФІЗИКА ТА НОВІТНІ ТЕХНОЛОГІЇ»

Редакція журналу МНТ повідомляє читачів про передплату (що починається з будь-якого місяця випуску). Журнал МНТ входить за індексом **74312** до «Каталогу видань України». Рекомендуємо оформити передплату

1) у відділеннях поштового зв'язку через централізоване аґентство ДПРПВ «ПРЕСА» (вул. Георгія Кирпи, буд. 2[a], 03999 Київ, Україна; телефакси: +380 44 2890774 / 2480377 / 2480384 / 2487802 / 2480406); e-mail: pod_ukr@presa.ua, rozn@presa.ua, info@presa.ua) або

2) через Internet:

http://presa.ua/metallofizika-i-novejshie-tehnologii.html?___SID=U

(передплатний індекс МНТ: 74312) або ж

3) безпосереднім перерахуванням від **170 грн.** за один випуск до **2040 грн.** за один том (12 випусків на рік):

«ОТРИМУВАЧУ»: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України
на розрахунковий рахунок № UA058201720313291001201001901 в банку ГУДКСУ в м. Києві
Код банку: 820172
Код єдиного державного реєстру підприємств і організацій України (ЕДРПОУ): 05417331
Для «ПОСТАЧАЛЬНИКА» — Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України
Свідоцтво платника податку на додану вартість (ПДВ) № 36283185, індивідуальний податковий номер (ІПН) 054173326066
Код призначення платежу: 25010100
ПРИЗНАЧЕННЯ ПЛАТЕЖУ: за журнал «Металофізика та новітні технології» (том(и), номер(и), рік(роки)) для РВВ ІМФ НАНУ
ПІДСТАВА: передоплата 100%.

INFORMATION FOR FOREIGN SUBSCRIBERS

Editorial Board of a Monthly Research Journal 'Metallophysics and Advanced Technologies' (transliteration: **'Metallofizika i Noveishie Tekhnologii'**) (CODEN: MNTEEU; ISSN: 1024-1809) advertises the subscription on an annual basis. Orders should be placed through one of the methods described below. Besides the subscription *via* the centralized service by State Enterprise 'PRESA' (2[a] Georgiy Kyrpa Str., UA-03999 Kyiv, Ukraine; faxes: +380 44 2890774 / 2480377 / 2480384 / 2487802 / 2480406 / 2487809; e-mail: pod_ukr@presa.ua, rozn@presa.ua, info@presa.ua) or *via* Internet:

http://presa.ua/metallofizika-i-novejshie-tehnologii.html?___SID=U

the Editorial Board will take orders sent directly to the Editorial Board. To obtain our journal, the persons and institutions, interested in this title, should made the definite payment sent, according to the order, to the account of the Publisher—G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine.

The journal frequency is 12 issues per year. The annual subscription rate for 'Metallophysics and Advanced Technologies' is 156 USD (or 132 EUR), including airmail postage, packing and handling charges. All other-currency payments should be made using the current conversion rate set by the Publisher (subscribers should contact the Editorial Board).

Subscription is valid after obtaining by the Editorial Board of banker's order. Banker's order should be sent to the address:
G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine,
currency account No. UA603223130000025308000000067, MFO 322313,
in the Kyiv's Branch of JSC 'The State Export-Import Bank of Ukraine' (Public Joint Stock Company 'Ukreximbank') (11[b] Bulvarno-Kudryavska Str., UA-04053 Kyiv, Ukraine)
simultaneously with written notice providing the Editorial Board with a copy of banker's order for subscription and detailed address for mailing.

Prepayment is 100%.

Address of the Editorial Board: G. V. Kurdyumov Institute for Metal Physics, N.A.S. of Ukraine, 36 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine.
E-mail: mfint@imp.kiev.ua (with subject beginning by word 'mfint')
Fax: +380 44 4242561. Phone: +380 44 4249042, +380 4241221.

After receiving of banker's order, the Editorial Board will send the guarantee letter to the subscriber's address for mailing the journal for a corresponding term.

The Editorial Board of this journal hopes for effective co-operation with its present and future readers and requests to promote the maximum information about its contents to persons and organizations concerned.